



Impact of Radiation-Induced Microstructures on the Integrity of Spent Nuclear Fuel (SNF) Elements in Long-Term Storage

Neslihan Yanikömer, Rahim Nabbi, and Klaus Fischer-Appelt

Chair of Repository Safety (ELS), Institute of Repository Safety (ELS),
RWTH Aachen University, Aachen, 52062, Germany

Correspondence: Neslihan Yanikömer (yanikoemer@els.rwth-aachen.de)

Published: 10 November 2021

Abstract. The current safety concept provides for a period in the range of 40 years for interim storage of spent fuel elements. Since the requirement for proof of safety for up to 100 years arises, the integrity of the spent fuel elements in prolonged interim storage and long-term repositories is becoming a critical issue. In response to this safety matter, this study aims to assess the impact of radiation-induced microstructures on the mechanical properties of spent fuel elements, in order to provide reliable structural performance limits and safety margins.

The physical processes involved in radiation damage and the effect of radiation damage on mechanical properties are inherently multiscale and hierarchical. Damage evolution under irradiation begins at the atomic scale, with primary knock-on atoms (PKAs) resulting in displacement cascades (primary damage), followed by the defect clusters leading to microstructural deformations. In this context, we have developed and applied a multi-scale simulation methodology consistent with the multistage damage mechanisms and the corresponding effects on the mechanical properties of spent fuel cladding and its integrity. Within the improved hierarchical modelling sequence, the effect of the radiation field on the fuel element cladding material (Zircalloy-4) is assessed using Monte Carlo methods. A molecular dynamics method is employed to model damage formation by PKAs and primary damage defect configurations. The formation of clusters and evolution of microstructures are simulated by extending the simulation sequence to a longer time scale with the kinetic Monte Carlo (KMC) method.

Transferring the calculated radiation-induced microstructures into macroscopic quantities is ultimately decisive for the structural/mechanical behaviour and stability of the cladding material, and thus for long-term integrity of the spent fuel elements. Results of the multiscale modelling and simulations as well as a comparison with experimental results will be presented at the conference session.

Kurzfassung. Das aktuelle Sicherheitskonzept sieht für die Zwischenlagerung abgebrannter Brennelemente einen Zeitraum von 40 Jahren vor. Da die Forderung nach einem Sicherheitsnachweis für bis zu 100 Jahre aufkommt, wird die Integrität der abgebrannten Brennelemente in der verlängerten Zwischenlagerung und in Endlagern immer mehr zu einem entscheidenden Thema. Als Beitrag zur Diskussion der Sicherheitsfrage ist das Ziel dieser Studie, die Auswirkungen der strahleninduzierten Mikrostrukturen auf die mechanischen Eigenschaften der abgebrannten Brennelemente zu bewerten, um zuverlässige bautechnische Grenzwerte und Sicherheitsmargen zu ermitteln.

Die physikalischen Prozesse bei der Entstehung von Strahlenschäden und ihre Auswirkungen auf die mechanischen Eigenschaften sind von Natur aus multiskalig und hierarchisch. Die Schadensentwicklung durch Strahlung beginnt auf atomarer Ebene mit primären Rückstoßatomen, die zu Verschiebungskaskaden führen (Primärschäden), gefolgt von Defektclustern, die zu mikrostrukturellen Verformungen führen. In diesem Zusammenhang haben wir eine Multiskalen-Simulationsmethodik entwickelt und angewandt, die mit den mehrstufigen Schadensmechanismen und den entsprechenden Auswirkungen auf die mechanischen Eigenschaften der Hüllrohre für abgebrannte Brennelemente und deren Integrität übereinstimmt. Innerhalb der verbesserten hierarchischen Modellierungssequenz wird die Wirkung des Strahlungsfeldes auf das Hüllmaterial (Zirkalloy-4) des

Brennelements mit der Monte-Carlo-Methode ermittelt. Es wird eine Molekulardynamik-Methode eingesetzt, um die Bildung von Schäden durch primäre Rückstoßatome und primäre Defektkonfigurationen zu modellieren. Die Bildung von Clustern und die Entwicklung von Mikrostrukturen werden simuliert, indem die Simulationssequenz mit der kinetischen Monte-Carlo-Methode (KMC) auf eine längere Zeitskala ausgedehnt wird.

Der Transfer der berechneten strahleninduzierten Mikrostrukturen in makroskopische Größen ist letztlich entscheidend für das strukturelle/mechanische Verhalten und die Stabilität des Hüllmaterials und damit für die Langzeitintegrität der abgebrannten Brennelemente. In der Konferenzsession werden die Ergebnisse der Multi-skalenmodellierung und -simulationen sowie ein Vergleich mit den experimentellen Ergebnissen vorgestellt.

Acknowledgements. The authors would like to express appreciation for the support of the sponsor, “BMW: Federal Ministry for Economy and Energy”, under the Nuclear Safety and Waste Disposal Research grant programme (project number: 1501615).

Financial support. This research has been supported by the Bundesministerium für Wirtschaft und Energie (grant no. 1501615).