

ГИДРОЦИРКОНИЕВАЯ РЕАКЦИЯ В ГЕТЕРОГЕННЫХ КОМПОЗИЦИЯХ

В.К. Милинчук, Э.Р. Клишпонт, В.И. Белозеров, А.В. Загородняя

Обнинский институт атомной энергетики НИЯУ МИФИ

249040, Калужская обл., г. Обнинск, Студгородок, 1.

Р

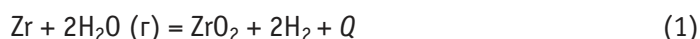
Представлены результаты исследований, свидетельствующие о протекании гидроциркониевой реакции генерации водорода при температурах ниже 100°C в гетерогенных композициях, содержащих цирконий и химические активаторы (кристаллогидрат метасиликата натрия, жидкое натриевое стекло, негашеная известь). Выход водорода растет с повышением температуры и при 95°C составляет ~ 0.1 – 0.2 л на 1 г циркония. Обработка циркония γ -излучением, выдержкой в кислых и нейтральных водных средах увеличивает выход водорода примерно в 1.2 раза. Гидроциркониевая реакция обусловлена удалением химическими активаторами с поверхности металла пассивирующего защитного слоя оксида циркония ZrO_2 . Возможность протекания гидроциркониевой реакции следует учитывать при организации технических мероприятий по обеспечению водородной безопасности ядерных энергетических установок.

Ключевые слова: вода, цирконий, водород, гидроциркониевая реакция, оксид циркония, гидрогетерогенная композиция, жидкое натриевое стекло, кристаллогидрат метасиликата натрия, негашеная известь.

ВВЕДЕНИЕ

Ранее было установлено, что алюминий и алюминиевые сплавы эффективно разлагают воду на водород при нормальном давлении и температурах до 100°C, если гетерогенные композиции содержат химические реагенты, переводящие металл в активное состояние по отношению к воде путем удаления пассивирующего защитного слоя оксида алюминия Al_2O_3 [1 – 4]. Для установления общих закономерностей взаимодействия конструкционных материалов с водной средой ядерных энергетических установок (ЯЭУ) следует выяснить, возможно ли разложение воды на водород при таких же условиях эксплуатации другими конструкционными материалами.

Большой интерес представляют исследования поведения в водных средах циркония и циркониевых сплавов, широко применяемых в качестве конструкционных материалов тепловыделяющих сборок, в виде которых используется ядерное топливо в реакторах. Циркониевые сплавы защищены от прямого контакта с водой и водяным паром поверхностным слоем оксида циркония ZrO_2 . При температурах выше 860°C протекает пароциркониевая реакция в соответствии с уравнением



с выделением водорода (~ 0.5 л на 1 г прореагировавшего циркония) и большого количества тепла $Q = 6530$ кДж/кг [5 – 9]. При высокой температуре происходит разрушение и удаление поверхностного защитного слоя оксида циркония, образуется акти-

© В.К. Милинчук, Э.Р. Клишпонт, В.И. Белозеров, А.В. Загородняя, 2016

вирунный «чистый» цирконий (без оксидного слоя), который эффективно взаимодействует с водяным паром.

В работе представлены результаты исследований, свидетельствующие о том, что в гетерогенных композициях, содержащих цирконий и химические активаторы, при температурах ниже 100°C протекает гидроциркониевая реакция с образованием водорода при взаимодействии циркония с водой.

МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Для исследований был взят порошок кальциетермического циркония марки ПЦрК1 (ТУ 48-4 – 234-84) с содержанием активного циркония не менее 96%, водорода не более 0.15%, углерода не более 0.05%, железа не более 0.05%, кальция не более 0.05%, хлора не более 0.003%, фракций с размерами частиц ~10 мкм не менее 50% и удельной поверхностью ~ 2200 см²/г. В качестве активатора циркония были взяты жидкое натриевое стекло, кристаллогидрат метасиликата натрия состава Na₂SiO₃·9H₂O с температурой плавления 48°C и негашеная известь.

Исследование кинетики накопления водорода включает в себя следующие процедуры. Реакционная смесь готовится путем тщательного перемешивания циркониевого порошка и активатора в определенной пропорции с добавлением дистиллированной воды [4]. Навеска смеси загружалась в стеклянную колбу объемом 500 мл с трубкой для отвода водорода через воду в измерительную ячейку установки. Реакционный сосуд помещался в термостат и нагревался до заданной температуры. Мониторинг генерации водорода проводился путем замера количества выделившегося водорода в измерительной ячейке. Эксперименты выполнялись на композициях состава: 1 г порошка циркония, 1 (2) г химического активатора и 10 г дистиллированной воды в диапазоне температур от комнатной до 95°C.

Для радиационной обработки порошок циркония помещали в толстостенные стеклянные сосуды объемом 500 мл, которые облучали γ -излучением при комнатной температуре на воздухе, используя γ -источник ⁶⁰Co, дозами 1.0 и 2.0 МГр при мощности поглощенной дозы 1.5 Гр/с [4]. Образцы циркония выдерживали при комнатной температуре в водном растворе борной кислоты (концентрация 16 г/л) и в дистиллированной воде в течение 170-ти часов.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На рисунке 1 приведены кривые накопления водорода в композициях, содержащих в качестве активатора циркония кристаллогидрат метасиликата натрия состава Na₂SiO₃·9H₂O. Видно, что с повышением температуры растет скорость накопления водорода. Количество выделившегося водорода достигает определенного предела, составляющего при 40°C 50 мл и при 95°C 100 мл. При этих температурах в реакции образования водорода участвует только часть металла.

Максимальные выходы водорода в композициях, содержащих в качестве активатора циркония кристаллогидрат метасиликата натрия, жидкое натриевое стекло и негашеную известь, в зависимости от количества активатора и температуры приведены в табл. 1. Видно, что использованные химические реагенты являются активаторами циркония, при наличии которых композиции генерируют водород. Увеличение выхода водорода при повышении температуры зависит от типа активатора: предельный выход при 95°C при использовании кристаллогидрата метасиликата натрия увеличивается примерно в два – три раза, жидкого натриевого стекла примерно в шесть раз, гашеной извести – в пять – шесть раз. При увеличении в составе композиции количества активатора в два раза выход водорода возрастает примерно на 40%. Соотношение компонентов в композиции 1:1(2):10 оптимально для получения максимального выхода водорода, который при протекании гидроциркониевой ре-

акции в исследованном интервале температур составляет 20 – 30% от максимального выхода водорода пароциркониевой реакции при высоких температурах (0.5 л на 1 г циркония).

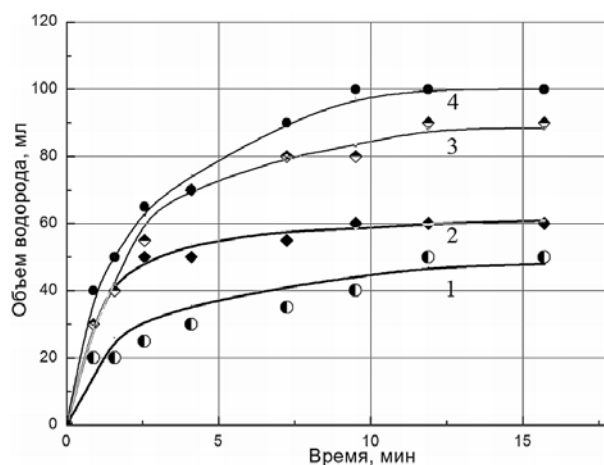


Рис.1. Кривые накопления водорода в композициях, содержащих 1 г порошка циркония, 1 г кристаллогидрата метасиликата натрия $\text{Na}_2\text{SiO}_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$ и 10 г дистиллированной воды, в зависимости от температуры, °C: 1 – 40, 2 – 60, 3 – 80, 4 – 95

Таблица 1

Выход водорода (мл) в зависимости от температуры и количества химического активатора

Химический активатор	Соотношение компонентов	40°C	60°C	80°C	95°C
Кристаллогидрат метасиликата натрия	1:1:10	50	60	90	100
	1:2:10	50	65	100	140
Жидкое натриевое стекло	1:1:10	20	60	110	130
	1:2:10	25	80	120	150
Гашеная известь	1:1:10	25	80	110	150
	1:2:10	35	85	130	160

Для выяснения кинетики и механизма протекания гидроциркониевой реакции важно изучить влияние факторов, имитирующих условия ЯЭУ. С этой целью цирконий подвергали воздействию γ -излучения ^{60}Co и выдержке в нейтральных и кислых водных растворах. Как видно на рис. 2, в композиции, содержащей γ -облученный дозой 1 МГр цирконий, увеличиваются скорость выделения и предельный выход водорода. Это свидетельствует об уменьшении химической стойкости оксида циркония по отношению к химическому активатору после воздействия радиации. О влиянии температуры и типа активатора на выход водорода в композициях с цирконием, облученным на воздухе при комнатной температуре дозой 2 МГр, можно судить по результатам, приведенным в табл. 2. Выходы водорода в композициях с γ -облученным цирконием близки при различных температурах, а предельные выходы водорода при 95°C одинаковы для композиций с различными активаторами. Эти данные свидетельствуют об одинаковой эффективности используемых химических активаторов циркония.

Выходы водорода в композициях с цирконием, предварительно обработанным кислыми и нейтральными водными растворами (активатор – кристаллогидрат метасиликата натрия), в зависимости от температуры приведены в табл. 3. Видно, что предварительная выдержка исходного и γ -облученного циркония в кислой и нейтральной воде в течение 170-ти часов незначительно влияет на выход водорода, который при 95°C составляет примерно 185 мл.

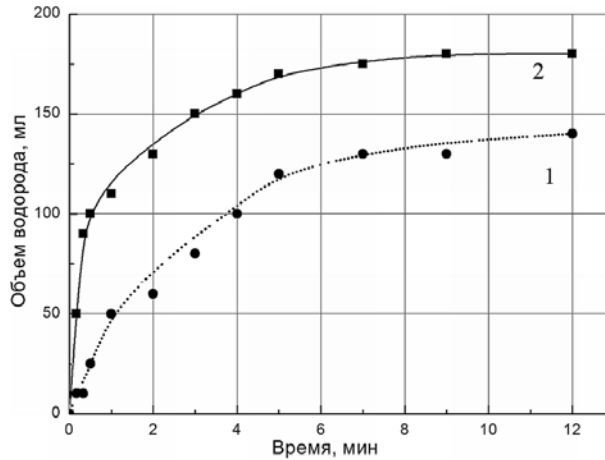


Рис.2. Кривые накопления водорода в композициях с цирконием, содержащих исходный порошок циркония (кривая 1) и порошок циркония, γ -облученный дозой 1 МГр (кривая 2). Состав композиции: 1 г порошка циркония, 1 г гашеной извести и 10 г дистиллированной воды. Температура 95°C

Таблица 2
Выход водорода (мл) в композициях с цирконием, γ -облученным на воздухе при комнатной температуре дозой 2 МГр, в зависимости от температуры и вида химического активатора

Химический активатор	Соотношение компонентов	V, мл			
		40°C	60°C	80°C	95°C
Кристаллогидрат метасиликата натрия	1:1:10	60	100	125	185
	1:2:10	60	105	135	195
Жидкое натриевое стекло	1:1:10	30	60	110	180
	1:2:10	35	70	120	180
Гашеная известь	1:1:10	60	80	120	190
	1:2:10	60	90	140	190

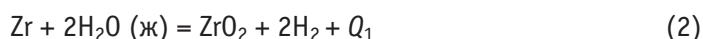
Таблица 3
Выход водорода (мл) в композициях с цирконием, предварительно выдержанным в кислоте и нейтральном водном растворе (активатор – кристаллогидрат метасиликата натрия)

Вид циркония	Среда	Соотношение компонентов	V, мл	
			80°C	95°C
Исходный цирконий	Раствор борной кислоты	1:1:10	150	180
		1:2:10	155	190
Цирконий γ -облученный, доза 1 МГр	Раствор борной кислоты	1:1:10	130	180
		1:2:10	160	185
Цирконий γ -облученный, доза 2 МГр	Нейтральная вода	1:1:10	140	180
		1:2:10	140	180

Известно, что цирконий активно взаимодействует с кислородом и водой с образованием на поверхности сплошного и устойчивого слоя оксида ZrO_2 с фактором сплошности Пиллинга-Бэдвордса $\alpha = 1.60$ [10]. Оксидный слой обладает высокой химической, радиационной и термической стойкостью (температура плавления 2715°C), гарантирующей высокую коррозионную устойчивость циркониевых материалов при высоких температурах в интенсивных радиационных полях. Как было отмечено выше, парациркониевая реакция протекает при взаимодействии циркония с водяным паром после термомеханического разрушения и удаления поверхностного оксидного слоя при нагревании циркония выше 860°C.

Как и другие металлические материалы, поверхность циркония неоднородна, со-

держит различные точечные, поверхностные и объемные дефекты, которые при воздействии радиации и температуры в водной среде претерпевают физико-химические превращения, сопровождающиеся разрушением сплошности оксидного слоя, образованием микротрещин и участков металла без оксидного слоя. Образующиеся в оксиде циркония при воздействии химических реагентов, γ -лучей и других внешних факторов смещенные атомы, вакансии и линейные дефекты ослабляют связи в его кристаллической решетке и повышают ее свободную энергию, способствующую переходу ионов и молекул твердого тела в жидкую фазу [11, 12]. В результате необратимых изменений химического строения и структуры кристаллической решетки ZrO_2 нарушается сплошность оксидной пленки и снижается величина фактора сплошности Пиллинга-Бэдвордса. Разрушения и удаления деструктурированной оксидной пленки открывают участки чистого циркония, к которым по микротрещинам оксидного слоя диффундируют молекулы воды, и протекает гидроциркониевая реакция в соответствии с уравнением

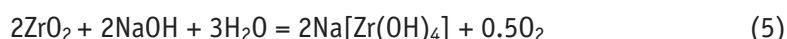


с выделением водорода и тепла Q_1 .

В основе гидроциркониевой реакции генерации водорода лежат процесс активации циркония путем удаления с поверхности металла слоя оксида циркония ZrO_2 химическим активатором и последующая реакция активированного циркония с водой. Можно предположить следующую схему протекания гидроциркониевой реакции генерации водорода. Рассмотрим ее на примере композиции, содержащей в качестве химического активатора кристаллогидрат метасиликата натрия $Na_2SiO_3 \cdot 9H_2O$. Центральным звеном химического процесса в этой гетерогенной композиции являются гидролиз метасиликата натрия и реакция окисления циркония водой с образованием водорода. На первой стадии происходит гидролиз силикатной соли с образованием гидроксида натрия $NaOH$:



Гидроксид натрия взаимодействует с диоксидом циркония по реакции



с образованием гидроксицирконата натрия $Na[Zr(OH)_4]$. Пленка окиси циркония на частицах малых размеров (со средним размером около 10 мкм) может не иметь устойчивой кристаллической структуры, свойственной объемной фазе, и будет обладать большей химической активностью [12]. Тонкая оксидная пленка устраняется действием на цирконий водного раствора щелочи $NaOH$ при нагревании. Образовавшийся после удаления оксидной пленки активированный цирконий $Zr_{акт}$ участвует в восстановлении водорода из воды по схеме гидроциркониевой реакции (2). При полном окислении циркония в пароциркониевой реакции на 1 г прореагировавшего циркония образуется около 0.5 г водорода. При протекании гидроциркониевой реакции при температурах до $95^\circ C$ выход водорода составляет 20 – 30% от выхода водорода пароциркониевой реакции.

Известны высокая химическую активность циркония и его склонность к взаимодействию с водородом. При этом в зависимости от количества поглощенного водорода и температуры водород находится в цирконии либо в растворенном виде, либо в виде гидрида циркония [13 – 18]. Важно, что взаимодействие циркония с водородом начинается при температуре ниже $100^\circ C$. Авторами будет продолжено исследование поведения водорода в изучаемых гетерогенных композициях.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе установлено, что цирконий обладает способностью эффективно разлагать воду на водород не только в паровой фазе при высоких температурах (пароциркониевая реакция), но и в жидкой фазе при относительно невысоких температурах (гидроциркониевая реакция). Поэтому при организации и осуществлении технических мероприятий по повышению водородной взрывозащиты на ЯЭУ необходимо учитывать в качестве возможного источника водорода также и гидроциркониевую реакцию. Надо также учитывать возможность протекания гидроциркониевой реакции с участием других химически менее активных активаторов, например, борной кислоты, соды, некоторых солей, оксидов металлов.

Литература

1. Милинчук В.К., Клишпонт Э.Р., Белозеров В.И. Автономный генератор водорода на основе химического разложения воды алюминием. // Известия вузов. Ядерная энергетика. – 2015. – № 2. – С. 49 – 59.
2. Милинчук В.К., Клишпонт Э.Р., Белозеров В.И., Ананьева О.А., Ларичева Т.Е., Куницына Т.Е. Химическое разложение воды на водород в гетерогенных алюминийсодержащих композициях. // Известия вузов. Ядерная энергетика. – 2014. – № 4. – С. 32-38.
3. Клишпонт Э.Р., Роцектаев Б.М., Милинчук В.К. Кинетика накопления водорода при химическом разложении воды в гетерогенных композициях. // Альтернативная энергетика и экология. – 2012. – № 9. – С. 116 – 120.
4. Милинчук В.К., Клишпонт Э.Р., Белозеров В.И., Хаврошина И.С., Садиков Э.И. Превращения оксидных покрытий алюминия при имитации факторов ядерных энергетических установок. // Известия вузов. Ядерная энергетика. – 2016. – № 2. – С. 45-54.
5. Кабакчи С.А., Булгакова Г.П. Радиационная химия в ядерном топливном цикле. – М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 1997. – 96 с.
6. Самойлов О.Б., Усынин Г.Б., Бахметьев А.М. Безопасность ядерных энергетических установок. – М.: Энергоатомиздат, 1989. – 280 с.
7. Кириллов И.А., Русанов В.Д., Фридман А.А. О механизме катастрофического окисления циркония. Препринт. – М.: ИАЭ им. И.В. Курчатова, 1990. – 20 с.
8. Келлер В. Д. Пассивные каталитические рекомбинаторы водорода для атомных электростанций. // Теплоэнергетика. – 2007. – № 3. – С. 65–68.
9. Neeb Karl-Heinz. The radiochemistry of nuclear power plants with light water reactors. – Berlin, New York: Walter de Gruyter, 1997. – 733 p.
10. Семенова И.В., Флорианович Г.М., Хорошилов А.В. Коррозия и защита металлов от коррозии. – М.: Физматлит, 2002. – 336 с.
11. Ковтуненко П.В. Физическая химия твердого тела. Кристаллы с дефектами. / Учеб. для хим.-технол. спец. вузов. – М.: Высшая школа, 1993. – 352 с.
12. Котов А.Г., Громов В.В. Радиационная физика и химия гетерогенных систем. – М.: Энергоатомиздат, 1988. – 232 с.
13. Бабич Б.Н., Вершинина Е.В., Глебова В.А., Калихман В.Л. Металлические порошки и порошковые материалы. Справочник. / Под ред. Ю.В. Левинского – М.: ЭКОМЕТ, 2005. – 520 с.
14. Андриевский А. Материаловедение гидридов. – М.: Металлургия, 1986. 128 с.
15. Калин Б.А., Платонов П.А., Тузов Ю.В., Чернов И.И., Штромбах Я.И. Конструкционные материалы ядерной техники. – М.: НИЯУ «МИФИ», 2012. – 736 с.
16. Черняев Т.П., Остапов А.В. Водород в цирконии. // ВАНТ. Сер. «Обеспечение безопасности АЭС». – 2013. – Т. 87. – № 5. – С. 16 – 32.
17. Кириченко В.Г., Азаренко Н.А. Ядерно-физическое материаловедение сплавов циркония. – Харьков: ХНУ им. В.Н. Каразина, 2012. – 122 с.
18. Янилкин А.В. Моделирование диффузии водорода в гидриде циркония на основе метода квантовой молекулярной динамики. // Физика твердого тела. – 2014. – Т. 56. – Вып. 9. – С. 1816-1821.

Поступила в редакцию 07.09.2016 г.

Авторы

Милинчук Виктор Константинович, профессор, доктор хим. наук

E-mail: milinchuk@iate.obninsk

Клишпонт Эдуард Рейнгольдович, доцент, канд. хим. наук

E-mail: kedward314@gmail.com

Белозеров Владимир Иванович, доцент, канд. техн. наук

E-mail: v.i.belozеров@iate.obninsk

Загородняя Анастасия Валерьевна, студентка

E-mail: kedward314@gmail.com

UDC 620.9 + 544 (075)

HYDROZIRCONIUM REACTION IN HETEROGENEOUS COMPOSITIONS

Milinchuk V.K., Klinshpont E.R., Belozеров V.I., Zagorodnyaya A.V.

Obninsk Institute for Nuclear Power Engineering,
National Research Nuclear University «MEPhI»
1 Studgorodok, Obninsk, Kaluga reg., 249020 Russia

ABSTRACT

The research results presented in this article show the flow of a hydrozirconium reaction of hydrogen generation at temperatures below 100°C in heterogeneous compositions containing zirconium and a chemical activator (e.g., hydrated sodium metasilicate, sodium silicate glass, quicklime). The hydrogen yield increases with a temperature increase up to 95°C and is about 0.1–0.2 liters per 1 g of zirconium. Increasing the hydrogen yield due to a temperature increase depends on the activator used: the yield limit at 95°C is increased by about 2–3 times for crystalline sodium metasilicate, about 6 times for liquid sodium glass, and about 5–6 times for slaked lime. Due to a two-fold increase in the amount of the activator in the composition, the hydrogen yield increases by approximately 1.4 times.

A hydrozirconium reaction is caused by the chemical activators removing the passivating protective zirconium oxide (ZrO_2) layer from the metal surface.

The zirconium oxide film on the particles of small sizes (about 10 microns) cannot have a stable crystal structure characteristic of the bulk phase and will have greater chemical activity. This thin oxide film is eliminated by the action of aqueous zirconium hydroxide solution with heating.

Processing of zirconium with γ -radiation as well as exposure to acidic and neutral aqueous media increase the hydrogen yield by about 1.2 times. The possibility of the hydrozirconium reaction occurrence should be considered in the organization of technical measures to ensure hydrogen safety at NPPs.

Key words: water, zirconium, hydrogen, hydrozirconium reaction, zirconium oxide, heterogeneous composition, sodium liquid glass, hydrated sodium metasilicate, lime.

REFERENCES

1. Milinchuk V.K., Klinshpont E.R., Belozеров V.I. Avtonomnyj generator vodoroda na osnove himicheskogo razlogeniya vody aluminium. [Standalone hydrogen generator based on the chemical decomposition of water with aluminum.] *Izvestiya vuzov. Yadernaya Energetika*. 2015, no. 2, pp. 49–59 (in Russian).
2. Milinchuk V.K., Klinshpont E.R., Belozеров V.I., Anan'ieva O.A., Laricheva T.E., Kunitsyna T.E. Chimicheskoe raslozhenie vody na vodorod v geterogennih aluminiumsoderzhaschih

kompozitsiyah [The chemical decomposition of water into hydrogen of aluminum in heterogeneous compositions]. *Izvestiya vuzov. Yadernaya Energetika*. 2014, no. 4, pp. 32-38 (in Russian).

3. Klinshpont E.R., Roschektaev B.M., Millinchuk V.K. Kinetika nakopleniya vodoroda pri chimicheskom razlozhenii vody v geterogennykh kompozitsiyah. [Kinetics of the accumulation of hydrogen in chemical decomposition of water in heterogeneous compositions.] *Al'ternativnaya energetika i ekologiya*. 2012, no.9, pp. 116-120 (in Russian).

4. Millinchuk V.K., Klinshpont E.R., Belozero V.I., Khavroshina I.S., Sadikov E.I. Prevrasheniya oksidnykh pokrytij aluminiya pri imitacii faktorov yadernykh energeticheskikh ustanovok. [The transformation of oxide coatings of aluminium by imitation factors of nuclear power plants]. *Izvestiya vuzov. Yadernaya Energetika*. 2016, no. 2, pp. 45-54 (in Russian).

5. Kabakchi S.A., Bulgakova G.P. Radiation chemistry in the nuclear fuel cycle. Moscow. RHTU n.a. D.I. Mendeleev Publ., 1997, 96 p. (in Russian).

6. Samoilov O.B., Usynin G.B., Bakhmetyev, A.M. The safety of nuclear energy installations. Moscow. Energoatomizdat Publ., 1989, 280 p. (in Russian).

7. Kirillov I.A., Rusanov V.D., Fridman A.A. O mehanizme katastroficheskogo okisleniya zirkoniya. [On the mechanism of catastrophic oxidation of zirconium.]. Preprint. Moscow. Institut Atomnoj Energii im. I.V. Kurchatova Publ., 1990, 20 p. (in Russian).

8. Keller V.D. Passivnye kataliticheskie recombiny vodoroda dlya atomnykh elektrostancij. [Passive catalytic recombinatory hydrogen for nuclear power plants.]. *Teploenergetika*. 2007, no. 3, pp. 65-68 (in Russian).

9. Karl-Heinz Neeb. The radiochemistry of nuclear power plants with light water reactors. Berlin, New York: Walter de Gruyter, 1997. 733 p.

10. Kovtunenkov P.V. Physical chemistry of solids. The crystals with defects. Moscow. Vysshaya shkola Publ., 1993, 352 p. (in Russian).

11. Semenova I. V., Florianovich G. M., Khoroshilov A. V. Corrosion and protection of metals from corrosion. Moscow. Fizmatlit Publ., 2002, 336 p. (in Russian).

12. Kotov A.G., Gromov V.V. Radiation physics and chemistry of heterogeneous systems. Moscow. Energoatomizdat Publ., 1988, 232 p. (in Russian).

13. Babich B.N., Vershinina E.V., Glebov V.A., Kalikhman V.L. Metallic powders and powder materials. Ed. Levinsky Yu.V. Moscow. EKOMET Publ., 2005, 520 p. (in Russian).

14. Andrievsky A. Material Science of hydrides. Moscow. Metallurgiya Publ., 1986, 128 p. (in Russian).

15. Kalin B.A., Platonov P.A., Tuzov Yu.V., Chernov I.I., Shtrombakh Ya.I. Fizicheskoe materialovedenie. V. 6. Konstrukcionnye materialy yadernoj tehniki [Materials of construction of nuclear technology]. Moscow. NRNU MEPhI Publ., 2012, 736 p. (in Russian).

16. Chernyaev T.P., Ostapov A.V. Vodorod v cirkonii. [The hydrogen in zirconium.]. *VANT. Ser. Obespechenie bezopasnosti AES*, 2013, v. 87, no. 5, pp. 16-32. (in Russian).

17. Kirichenko V.G., Azarenko N.A. Nuclear-physical metallography of zirconium alloys. Kharkov. KhNU n.a. Karazin Publ., 2012, 122 p. (in Russian).

18. Yanilkin A.V. Modelirovanie diffuzii vodoroda v gidride cirkoniya na osnove metoda kvantovoj molekulyarnoj dinamiki. [Modeling of hydrogen diffusion in zirconium hydride on the basis of quantum molecular dynamics.]. *Fizika tvyordogo tela*. 2014, v. 56, iss. 9, pp. 1816-1821 (in Russian).

Authors

Milinchuk Victor Konstantinovich, Professor, Dr. Sci. (Chemistry)

E-mail: milinchuk@iate.obninsk

Klinshpont Edward Reyngol'dovich, Associate Professor, Cand. Sci. (Chemistry)

E-mail: kedward314@gmail.com

Belozero Vladimir Ivanovich, Associate Professor, Cand. Sci. (Engineering)

E-mail: v.i.belozero@iate.obninsk

Zagorodnyaya Anastasiya Valer'evna, Student

E-mail: kedward314@gmail.com