ГОСКОРПОРАЦИЯ ПО АТОМНОЙ ЭНЕРГИИ «РОСАТОМ»

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ЦЕНТР ФИЗИКИ И МАТЕМАТИКИ (НЦФМ)

ФГУП «РОССИЙСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ЯДЕРНЫЙ ЦЕНТР –
ВСЕРОССИЙСКИЙ НИИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ ФИЗИКИ»

18-я Международная школа Национального центра физики и математики для молодых ученых и специалистов им. А. А. Курдюмова

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ИЗОТОПОВ ВОДОРОДА С КОНСТРУКЦИОННЫМИ МАТЕРИАЛАМИ

IHISM´25

Саров, 30 июня – 4 июля 2025 г.

СБОРНИК ТЕЗИСОВ

2025
г. Саров

Взаимодействие изотопов водорода с конструкционными материалами. IHISM´25. Сборник тезисов 18-й Международной школы Национального центра физики и математики для молодых ученых и специалистов им. А. А. Курдюмова / Под редакцией доктора технических наук А. А. Юхимчука. – Саров: ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 2025. – 77 с.: ил.

Сборник содержит тезисы докладов, представленных на 18-й Международной школе Национального центра физики и математики для молодых ученых и специалистов им. А. А. Курдюмова «Взаимодействие изотопов водорода с конструкционными материалами. IHISM´25». Материалы представлены по следующим темам: кинетика и термодинамика взаимодействия изотопов водорода с твердыми телами, включая эффекты радиогенного гелия; механические свойства и структурные превращения конструкционных материалов в среде водорода; гидриды и гидридные превращения; аппаратура и методы исследования.

Печатается с оригинальных текстов авторов.

Составители:
Ал. А. Юхимчук, И. А. Царёва.

Организаторы:

Национальный центр физики и математики (НЦФМ)
ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»
Госкорпорация по атомной энергии «РОСАТОМ»

МЕЖДУНАРОДНЫЙ ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

Председатель:
Илькаев Р. И. – академик РАН, почетный научный руководитель ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», Россия

Заместитель председателя:
Юхимчук А.А. – д.т.н., ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», Россия

Члены комитета:
Алексеев И. А. – НИЦ «Курчатовский институт», ПИЯФ, Россия
Бисикало Д. В. – академик РАН, АНО «НЦФМ», Россия
Беграмбеков Л. Б. – проф., НИЯУ «МИФИ», Россия
Вербецкий В. Н. – проф., МГУ им. М.В. Ломоносова, Россия
Давыденко С. С. – к.ф.-м.н., АНО «НЦФМ», Россия
Денисов Е. А. – к.ф.-м.н., доцент СПбГУ, Россия
Заика Ю. В. – д.ф.-м.н., КарНЦ РАН, Россия
Ковалишин А. А. – член-корр. РАН, НИЦ «Курчатовский институт», Россия
Лившиц А. И. – проф., СПбГУТ, Россия
Литовченко И. Ю. – проф., ТГУ, Россия
Магомедбеков Э. П. – к.х.н., РХТУ, Россия
Нецкина О. В. – к.х.н., ИК СО РАН, Россия
Писарев А. А. – проф., НИЯУ «МИФИ», Россия
Постников А. Ю. – к.т.н., ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», Россия
Тажибаева И. Л. – проф., ИАЭ НЯЦ РК, Казахстан
Чувильдеев В. Н. – проф., ННГУ им. Н. И. Лобачевского, Россия

Секретарь комитета:
Бучирин А. В. – ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», Россия

ИСПОЛНИТЕЛЬНЫЙ КОМИТЕТ

Председатель:
Москалев О. А. – к.ф.-м.н., ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

Заместитель председателя:
Максимкин И. П.. – ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

Члены комитета:
Бучирин А. В. – ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»
Воронцова О. С. – ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»
Гевлич А. Н. – ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»
Голубева А. В. – НИЦ «Курчатовский институт»
Миронов В. Е. – ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»
Пешехонова О. Ф. – ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»
Сенягина М. Н. – ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»
Сорокин А. Л. – ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»
Тивикова О. А. – ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»
Чувиковский А. В. – ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»
Шишкова Т. А. – НИЦ «Курчатовский институт»
Юхимчук Ал. А. – ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

Секретарь комитета:
Царева И. А. – ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

ПРЕДИСЛОВИЕ

Международная школа «Взаимодействие изотопов водорода с конструкционными материалами» им. А. А. Курдюмова проводится в 18-й раз и четвертый раз организуется с участием Национального центра физики и математики (НЦФМ).

Сегодня мы отмечаем 20-летний юбилей с момента организации Школы. Первые Международные школы IHISM (Interaction of Hydrogen Isotopes with Structural Materials) Junior были проведены в 2005 и 2006 годах на базе учебного центра «Урозеро» Карельского госуниверситета под Петрозаводском (председатель локального оргкомитета профессор Ю. В. Заика) и стали очень популярны в среде молодых ученых, занимающихся водородной тематикой. С 2008 года Школа носит имя профессора Санкт-Петербургского госуниверситета А.А. Курдюмова, великого ученого и организатора, стоявшего у истоков её создания.

Организаторы Школы приняли решение, что фиксированного места её проведения не будет. При этом было решено проводить Школы ежегодно, а с периодичностью 2–3 года организовывать одновременно со Школой одноименную конференцию. С момента организации мероприятие проводилось в Петрозаводске (2005, 2006 и 2016 гг.), в Санкт-Петербурге (2007 г.), на теплоходе «Георгий Жуков» (2008 и 2012 г.), в Сарове (2009, 2014, 2019, 2023 и 2024 гг.), в Воронеже (2010 г.), в Звенигороде (2011 г.), в Москве (2015 г.), Протвино (2017 г.), Гатчине (2021 г) и Окуловке (2022 г.).

Многие из вас участвуют в работе Школы уже не первый раз и по-настоящему полюбили формат встреч, теплую атмосферу и домашнее гостеприимство. Надеемся, что и в этот раз наше мероприятие в поистине историческом месте никого не оставит равнодушным и каждый почерпнет здесь что-то новое для себя и поделится интересной информацией с коллегами из «водородного братства».

В сборнике представлены тезисы лекций и докладов участников Школы. Материалы традиционно сгруппированы по ключевым направлениям: кинетика и термодинамика взаимодействия изотопов водорода с твердыми телами, включая эффекты накопления радиогенного гелия; свойства и структурные превращения; гидриды и гидридные превращения; аппаратура и методы исследования.

Оргкомитет благодарит руководителей НЦФМ и ФГУП «Российский федеральный ядерный центр – ВНИИЭФ» за помощь в организации и финансовое обеспечение Школы.

Желаем вам успешной и плодотворной работы, интересных встреч, неизгладимых впечатлений, приятного и полезного общения на Школе!

Оргкомитет

СОДЕРЖАНИЕ

Тезисы лекций

Тезисы докладов

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ЦЕНТР ФИЗИКИ И МАТЕМАТИКИ

С. С. Давыденко

АНО «Национальный центр физики и математики», Москва

Сегодня Россия на пути научно-технологического развития столкнулась с новыми вызовами, ответами на которые должны стать новые научные результаты мирового уровня, укрепление технологического суверенитета, подготовка учёных высшей квалификации. В качестве одного из путей достижения этих целей Президент Российской Федерации в ноябре 2020 года дал поручение о создании в Сарове Национального центра физики и математики (НЦФМ). За два первых года своего существования НЦФМ объединил компетенции и возможности более чем 50 ведущих научных институтов, университетов и высокотехнологических компаний страны. В рамках научной программы НЦФМ лучшие отечественные физики и математики решают важнейшие проблемы мировой науки. Эти решения становятся основой для создания инновационных технологий как для атомной энергетики, так и для других отраслей промышленности, IT и медицины. В 2023 году в НЦФМ началось создание семи лабораторий класса «мидисайенс», которые призваны обеспечить быстрый начало трансфера технологий и выработать необходимые научно-технологические решения для создания с 2026 по 2030 годы установок класса «мегасайенс»: фотонной вычислительной машины рекордной производительности, центра исследования экстремальных световых полей на основе лазера с рекордной экзаваттной мощностью и многофункционального ускорительного комплекса с источником гамма-излучения рекордной яркости. Планируется, что к 2030 году на базе НЦФМ появится научный центр мирового уровня, где будут проживать около 10 тысяч человек.

НАПРАВЛЕНИЕ «ФИЗИКА ИЗОТОПОВ ВОДОРОДА» НАЦИОНАЛЬНОГО ЦЕНТРА ФИЗИКИ И МАТЕМАТИКИ. НАСТОЯЩЕЕ И БУДУЩЕЕ

А. А. Юхимчук

Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики, Саров

Направление № 8 «Физика изотопов водорода» Национального центра физики и математики (НЦФМ) напрямую касается тематики проводимой Школы. В рамках данного Направления проводятся исследования по следующим Проектам:

– исследования в области взаимодействия изотопов водорода с твердым телом;

– фундаментальные исследования в области нейтринной физики и нейтроноизбыточных ядер с использованием изотопов водорода и гелия.

В докладе приводятся результаты работ, выполненных в 2024 году по реализации научной программы НЦФМ. Обсуждаются планы работ на период 2026–2028 гг.

Исследование выполнено в рамках научной программы Национального центра физики и математики, направление № 8 «Физика изотопов водорода».

ПРОИЗВОДСТВО ТЯЖЕЛОЙ ВОДЫ – ИСТОРИЯ И ПЕРСПЕКТИВЫ

И. Л. Растунова
rastunova.i.l@muctr.ru

Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, Москва

Тяжелая вода – оксид дейтерия с природным содержанием изотопов кислорода – является важным неядерным материалом для атомной и термоядерной энергетики, что обусловлено ее ядерно-физическими свойствами, такими как высокий коэффициент замедления и малое сечение захвата нейтронов. Наибольшее потребление тяжелой воды в мире обусловлено ее использование в качестве замедлителя нейтронов и теплоносителя в тяжеловодных реакторах. Также в последние годы наблюдается повышенный интерес к дейтерозамещенным органическим и неорганическим соединениям, которые находят применение в различных областях науки, а также в медицине и технике.

Производство тяжелой воды представляет собой концентрирование дейтерия от природного содержания (0,014–0,015 ат.%) до продукта с концентрацией не ниже 99,8 ат.%. Вследствие полной химической идентичности всех изотопологов воды, получение тяжелой воды возможно только с использованием процессов разделения изотопов водорода физико-химическими методами.

В докладе представлен обзор основных способов разделения изотопов водорода (ректификация, химический изотопный обмен), анализ промышленных установок получения тяжелой воды из природного сырья и способы переработки тяжеловодных отходов в России и за рубежом. Рассмотрены примеры расчета технологических схем разделения изотопов водорода.

ОТЕЧЕСТВЕННАЯ МИНЕРАЛЬНО-СЫРЬЕВАЯ БАЗА ДЛЯ ПРОИЗВОДСТВА РЕДКИХ И РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ

С. А. Мельников, В. В. Санин, Д. И. Смирнов*

**SergeyAleksMelnikov@rosatom.ru*

Государственный научно-исследовательский и проектный институт редкометаллической промышленности им. Н. П. Сажина, Москва

В последнее время в различных отраслях технологии и науки во все возрастающих масштабах находят применение металлы, которые еще на рубеже середины прошлого века мало или вовсе не использовались. Как правило, такие элементы относятся к группе «редких металлов». К сожалению, к настоящему времени не сложилось единого подхода к классификации редких металлов по каким-либо единым физико-химическим признакам, хотя этому вопросу уделяли внимание выдающиеся ученые Д. И. Менделеев и В. И. Вернадский.

С первых лет существования СССР производство редких металлов стало быстро развиваться: в 1927 г. было освоено производство металлического вольфрама, в 1928 г. – молибдена, в 1929 г. – твердых сплавов на основе карбидов тугоплавких металлов, 1931 г. – ферросплавов вольфрама и молибдена, в 1932 г. – бериллия, в 1933 г. – тантала и лития, в 1932–1935 гг. – феррованадия. Особенно высокий темп роста в производстве редких металлов отмечался в послевоенный период, что было обусловлено развитием авиации, ракетостроения, вакуумной техники, полупроводниковой электроники, атомной энергетики. Это в значительной мере было обусловлено интенсивными геологоразведочными работами по изысканию редких металлов и созданию отечественной минерально-сырьевой базы.

В производстве редких металлов использовалась минерально-сырьевая база Советского Союза, которая с распадом СССР осталась вне досягаемости для предприятий на территории РФ. Тем не менее в настоящий момент Россия обладает значительной минерально-сырьевой базой для производства редких (РМ) и редкоземельных металлов (РЗМ). Развитие этой отрасли требует инвестиций, инновационных технологий и государственной поддержки для снижения зависимости от импорта.

Не менее важным является уделение внимания к проблеме расширения минерально-сырьевой базы редких металлов за счет переработки техногенного сырья: разрабатываются технологии по вторичному использованию отработанных различных функциональных материалов и изделия (электронный лом, РЗМ магниты, отработанные катализаторы и твердые сплавы и т. д.), извлечению ценных компонентов из отвалов месторождений.

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС LampGraph ДЛЯ ПРОВЕДЕНИ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ СВОЙСТВ МАТЕРИАЛОВ

А. А. Селезенев[1,2], *А. Ю. Алейников*[1], *Н. С. Ганчук, В. Ю. Королев*[1]

[1]Российский федеральный ядерный центр-Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики, Саров
[2]Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва

Программный комплекс LampGraph предназначен для проведения квантово-химических и молекулярно-динамических расчетов свойств материалов в параллельном режиме на высокопроизводительных вычислительных кластерах. Программные модули комплекса предоставляют развитый пользовательский графический интерфейс для создания, редактирования и визуализации любых кристаллических структур. В программном комплексе LampGraph реализована возможность импорта и экспорта кристаллических структур в различных широко используемых файловых форматах. В состав комплекса включена база данных из более 800 органических и неорганических кристаллических структур различных материалов, включая гидриды различных металлов. Программный комплекс LampGraph позволяет решать следующие основные задачи:

- подготовка кристаллической или молекулярной атомной структуры для проведения молекулярно-динамического расчета;
- создание структуры молекулярного кристалла по заданной структуре молекулы и кристалла;
- создание шаблона управляющего файла для проведения молекулярно-динамического расчета характеристик материалов с использованием программного комплекса LAMMPS или квантово-химического расчета с использованием программного комплекса Quantum ESPRESSO;
- настройка параметров запуска параллельного молекулярно-динамического расчета и контролируемого запуска на выполнение вычислительного модуля LAMMPS;
- пост-обработка результатов проведения молекулярно-динамического расчета в виде построения различных таблиц с результатами расчета и временных диаграмм в графическом виде;
- преобразование результатов проведения молекулярно-динамического расчета с последующей визуализацией динамики положения атомов;

Программный комплекс LampGraph может функционировать в операционной системе Windows и Linux.

ПОЛУЧЕНИЕ УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ ГИДРИДОВ МЕТАЛЛОВ НА ОСНОВЕ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И РАСЧЕТ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ

И. В. Маклашова
ivmaklashova@mephi.ru

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва

Для расчета теплофизических характеристик и получения уравнения состояния гидридов металлов разработана методика на основе термодинамического и молекулярно-динамического (МД) моделирования с использованием различных потенциалов межатомного и межмолекулярного взаимодействия. Методом молекулярной динамики в программном пакете LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) [1] были рассчитаны изотермы нереагирующих гидридов металлов в диапазоне давлений до 30 ГПа. Полученные МД результаты позволяют определить значения коэффициента модуля всестороннего сжатия K и производной модуля сжатия по давлению K', используемые в качестве параметров уравнения Берча–Мурнагана 3-го порядка. По результатам МД-моделирования могут быть определены коэффициенты уравнения состояния в форме Ми–Грюнайзена, широко применяемого для моделирования теплофизических свойств вещества. Верификация и валидация полученных результатов показала хорошее согласие с литературными данными в широком диапазоне изменения давления и температуры.

Таким образом, данная методика позволяет определить параметры уравнения состояния и рассчитывать теплофизические характеристики гидридов металлов в широком диапазоне давления и температуры с точностью, сопоставимой с экспериментальным определением рассматриваемых параметров.

Работа выполнена в рамках научной программы Национального центра физики и математики (проект 8 «Физика изотопов водорода», направление 8.1 «Исследования в области взаимодействия изотопов водорода с твердым телом»).

Литература

1. The classical molecular dynamics package LAMMPS [Электронный ресурс] / http://lammps.sandia.gov. 2004.

МЕТОДЫ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО И КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ВОДОРОДА С МЕТАЛЛАМИ

Ю. А. Богданова
yabogdanova@mephi.ru

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва

Теоретические методы моделирования процессов взаимодействия водорода с металлами базируются на моделях и математических алгоритмах для описания свойств веществ без физического эксперимента. К ним относятся теоретические уравнения состояний, эмпирические уравнения, а также методы молекулярной динамики (МД) (программный пакет LAMMPS [1]), которые в последнее время широко используются с ростом эффективности и производительности вычислительных систем. Методы молекулярной динамики, основанные на интегрировании уравнений движения Ньютона, позволяют хорошо проследить эволюцию системы на атомарном уровне.

Однако результаты МД-моделирования становятся нереалистичными в диапазоне экстремальных значений температур и давлений, когда значительное действие на систему оказывают квантовые эффекты. Поэтому для моделирования и анализа свойств материалов на атомарном уровне широко применяются методы квантовой молекулярной динамики (например, программный пакет Quantum Espresso, QE [2]), основанные на теории функционала плотности, который позволяет описывать электронную структуру ансамбля атомов на основе распределения электронной плотности.

Расчетные возможности пакетов QE и LAMMPS с помощью интерфейса MDI объединены в графическом интерфейсе пользователя LampGraph.

Таким образом, комплекс программных средств на основе методов классической и квантово-химической молекулярной динамики позволяет решить ряд задач, в том связанных с исследованием процессов взаимодействия изотопов водорода с конструкционными материалами, а именно рассчитать энергии равновесных конфигураций поверхностей металлов и их гидридов, определить энергию адсорбции атомов изотопов водорода на поверхности металлов, а также изучить влияние водорода на прочностные характеристики металлов и их гидридов.

Работа выполнена в рамках научной программы Национального центра физики и математики (проект 8 «Физика изотопов водорода», направление 8.1 «Исследования в области взаимодействия изотопов водорода с твердым телом»)

Литература

1. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator. https://www.lammps.org
2. Quantum ESPRESSO. https://www.quantum-espresso.org

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ H В ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ СПЛАВАХ

А. С. Рохманенков
rohmanenkov@gmail.com

Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова, Москва

ТДС-ИДЕНТИФИКАЦИЯ ПАРАМЕТРОВ ВОДОРОДОПРОНИЦАЕМОСТИ ДВУХСЛОЙНЫХ МЕМБРАН

Ю. В. Заика
zaika@krc.karelia.ru

Карельский научный центр Российской академии наук, Петрозаводск

Одним из эффективных экспериментальных методов исследования взаимодействия конструкционных материалов с изотопами водорода является термодесорбционная спектрометрия (ТДС). Образец (рассматриваем тонкую пластину из материала, обладающего металлическими свойствами), предварительно насыщенный растворенным атомарным водородом, относительно медленно нагревается в вакуумной камере. С помощью масс-спектрометра регистрируется поток дегазации. Достаточно часто на спектре (зависимость плотности потока десорбции с двухсторонней поверхности от текущей температуры) регистрируются несколько локальных пиков. Традиционно это связывают с обратимым захватом в различного рода ловушки (неоднородности материала) с разными энергиями связи. Но численные эксперименты на диффузионных моделях с нелинейными динамическими граничными условиями, описывающими динамику поверхностных концентраций, показывают возможность и иного сценария. Схематично: сначала водород покидает поверхность и приповерхностный объем (первый пик). Образуется большой градиент концентрации у поверхности. По этой причине и по мере дальнейшего нагрева существенно активизируется диффузионная подкачка из объема, что и приводит к последующему всплеску десорбции. В работе анализируются различные модели термодесорбции и приведены рекомендации, как различить сценарии дегазации, соответствующие указанным существенно разным физико-химическим причинам.

Основная цель доклада – представить модель ТДС, когда образец двухслойный (например, базовый материал покрыт защитным покрытием). Здесь возникают дополнительные сложности, связанные с моделированием процессов на стыке слоев, где проблематично получить информацию о концентрациях и проникающем потоке. За основу принята модель в форме уравнения диффузии с нелинейными динамическими граничными условиями, отражающими процессы на поверхности. Представлена вычислительная схема параметрической идентификации двухслойной модели водородопроницаемости по результатам эксперимента.

СО-ОСАЖДЕНИЕ КАК ПУТЬ НАКОПЛЕНИЯ ВОДОРОДА В ТОКАМАКАХ: ОПАСНОСТЬ, ФИЗИКА, РЕШЕНИЯ

С. А. Крат, А. С. Пришвицын, Е. А. Фефелова, Я. А. Васина, А. С. Попков, Ю. М. Гаспарян, А. А. Писарев*

**sakrat@mephi.ru*

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва

Накопление радиоактивного изотопа водорода трития в термоядерных установках представляется одним из серьёзных препятствий к реализации коммерческого управляемого термоядерного синтеза. Так, в международном токамаке-реакторе ИТЭР количество трития ограничено нормой в 700 г [1].

Со-осаждение – процесс одновременного осаждения продуктов эрозии обращённых к плазме элементов первой стенки реактора и частиц плазмы (изотопов водорода, гелия и т. д.). В результате со-осаждения происходит рост насыщенных водородом слоёв (плёнок). В отличие от процесса накопления за счёт имплантации в поверхность, который после достижения определённой дозы облучения выходит на насыщение, сопровождающееся резким замедлением скорости дальнейшего накопления, накопление за счёт со-осаждения может происходить практически неограниченно, порождая слои, насыщенные водородом на всю глубину. Содержание водорода даже в не образующих гидриды металлах, таких как вольфрам, может превышать 10 ат.%, [2], а в гидридообразующих металлах, таких как Be, достигать 60 ат.%. [3]. Толстые со-осаждённые плёнки могут отшелушиваться от поверхности, образуя пыль, что также представляет собой опасность для функционирования установок управляемого термоядерного синтеза.

Диапазон параметров осаждения, таких как температура поверхности, потоки и энергии водорода и продуктов эрозии, наличие примесей гелия и изотопный состав водорода очень широк даже в пределах одного токамака [4], не говоря о различных токамаках, стеллараторах и линейных установках. Свойства со-осаждённого слоя, его микроструктура может очень сильно разниться в зависимости от условий осаждения, делая построение каких-либо моделей и предсказание содержания водорода в слое гораздо более сложными задачами, чем они являются для имплантации водорода в уже существующую поверхность.

Актуальность со-осаждения как потенциальной опасности в последнее время значительно возросла в связи с обновлением базового сценария ITER, которое включает отказ от использования бериллиевой первой стенки в пользу стенки, полностью состоящей из W с регулярной боронизацией [5]. Несмотря на многолетний опыт использования бора для кондиционирования стенок термоядерных устройств, объем данных о со-осаждении бора и водорода крайне мал. Все доступные данные были получены с использованием разложения соединений бороводородов и могут не иметь отношения к со-осаждению бора и водорода, которое будет наблюдаться в токамаках. Кроме того, все доступные данные были получены для легкого изотопа водорода протия. Важность совместного осаждения возрастает с увеличением времени работы плазмы. Это становится особенно важным в стационарных и квазистационарных устройствах. Одним из таких устройств станет токамак с реакторными технологиями (ТРТ), который сейчас разрабатывается. В нем планируется использовать литий в качестве материала для обращённых к плазме элементов. Таким образом, можно выде-

лить три основных материала, имеющих отношение к термоядерному синтезу, – вольфрам, бор и литий. В этой работе представлены экспериментальные данные о со-осаждении для W, Li и B. Показаны кривые содержания водорода в совместно осажденных слоях в зависимости от параметров осаждения и обсуждены с точки зрения прогнозирования содержания водорода в будущих термоядерных устройствах на основе как эмпирического масштабирования [6], так и теоретического моделирования [7]. Предложен способ удаления тяжелых изотопов водорода из совместно осажденных слоев, основанный на изотопном обмене легкими изотопами водорода [8,9].

Литература

1. Roth J. et al. Recent analysis of key plasma wall interactions issues for ITER // J. Nucl. Mater. 2009. Vol. 390–391. P. 1–9.

2. Alimov V.K. et al. Deuterium trapping in tungsten deposition layers formed by deuterium plasma sputtering // J. Nucl. Mater. 2010. Vol. 399, № 2–3. P. 225–230.

3. De Temmerman G., Doerner R.P. Revised scaling equation for the prediction of tritium retention in beryllium co-deposited layers // Nucl. Fusion. IOP Publishing, 2009. Vol. 49, № 4. P. 042002.

4. Schmid K. et al. Quantitative modeling of fuel retention in the JET-C and JET-ILW wall configurations by WallDYN and predictions for ITER // J. Nucl. Mater. 2015. Vol. 463. P. 66.

5. Pitts R.A. et al. Plasma-wall interaction impact of the ITER re-baseline // Nucl. Mater. Energy. 2025. Vol. 42. P. 101854.

6. Založnik A. et al. Improved scaling law for the prediction of deuterium retention in beryllium co-deposits // Nucl. Fusion. 2022. Vol. 62, № 3. P. 036006.

7. Krat S.A. et al. Model for hydrogen accumulation in co-deposited layers // Nucl. Mater. Energy. 2020. Vol. 24. P. 100763.

8. Krat S. et al. Deuterium to protium isotope exchange in W-D co-deposited films below 200°C // J. Nucl. Mater. 2023. Vol. 575. P. 154228.

9. Krat S. et al. Isotope exchange in Li-D co-deposited layers at temperatures below 200 °C // J. Nucl. Mater. 2020. P. 152064.

БЛОКИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ГЕЛИЯ ВСТРЕЧНЫМ ПОТОКОМ РАЗРЕЖЕННОГО ВОДОРОДА

С. Р. Кузенов, А. О. Буснюк, А. И. Лившиц, Е. Ю. Передистов*

**skuzenov@ya.ru*

Санкт-Петербургский государственный университет телекоммуникаций
им. проф. М. А. Бонч-Бруевича, Санкт-Петербург

В виду строгих ограничений, содержание He в рабочей плазме ТЯР не должно превышать 5 %, поэтому газовая смесь, содержащая ~95 % D/T, должна непрерывно откачиваться из рабочей плазмы через дивертор и очищаться от He. Соответственно, отделение от He и возврат очищенного D/T обратно в реактор являются важными задачами топливного цикла ТЯР. Наиболее простым решением представляется использование металлических мембран, сверхпроницаемых по отношению к надтепловым водородным частицам, энергия которых составляет величину порядка 1 eV или более [1–4] и в то же время непроницаемыми для He.

При правильной работе металлических мембран ожидается образование двух зон, отличающихся по составу газа, при примерно одинаковом общем давлении (в диапазоне от 1 до 10 Па). В первой зоне (зона дивертора) основным компонентом смеси является D/T с небольшой долей He. Во второй зоне, расположенной ниже по течению относительно металлических мембран, содержание D/T существенно ниже за счет непрерывной откачки D/T из потока с помощью сверхпроницаемых мембран, но при этом пропорционально уменьшению D/T значительно растет содержание He. Таким образом, парциальное давление He во второй зоне оказывается значительно выше, чем в первой и такая компрессия He приводит к его последующей эффективной откачке вакуумным насосом. Однако, рост концентрации He во второй зоне приводит к «обратной» диффузии He в зону дивертора против направленного потока D/T смеси. В результате ключевым является вопрос о степени влияния потока D/T на диффузию He из второй зоны с высокой концентрацией He.

Для ответа на данный вопрос необходимо экспериментальным путем определить, насколько эффективно поток D/T может блокировать обратную диффузию He в диапазоне давлений от 1 до 10 Па, в зависимости от плотности потока D/T, парциального давления He и числа Кнудсена.

В работе представлены экспериментальные результаты по исследованию диффузии He против потока водорода в диапазоне давлений 0,1 – 100 Па, плотности потока водорода от $3{,}6*10^{15}$ до $3{,}6*10^{18}$ $см^{-2}$ и чисел Кнудсена от 0,1 до 100.

Литература

1. Алимов В. Н., Буснюк А. О., Кузенов С. Р., Передистов Е. Ю., Лившиц А. И. Взаимодействие изотопов водорода с конструкционными материалами / Под ред. А. А. Юхимчука (РФЯЦ−ВНИИЭФ, Саров, 2023), с. 10–37. DOI: 10.53403/9785951505378_2023_10.

2. C. Day, B. Butler, T. Giegerich, P.T. Lang, R. Lawless, B. Meszaros, Fusion Eng. Des., 109-111 (Pt A), 299 (2016). DOI: 10.1016/j.fusengdes.2016.03.008.

3. Карпов Д. А., Иванов А. Г., Лившиц А. И., Драничников А. Н. Физика плазмы, 47 (12), 1152 (2021). DOI: 10.31857/S0367292121120027 [D.A. Karpov, A.G. Ivanov, A.I. Livshits, A.N. Dranichnikov, Plasma Phys. Rep., 47, 1267 (2021). DOI: 10.1134/S1063780X21120023].

4. C. Li, A.J. Job, T.F. Fuerst, M. Shimada, J.D. Way, C.A. Wolden, J. Nucl. Mater., 582, 154484 (2023).

ПРОЕКТИРОВАНИЕ МАТЕРИАЛОВ

В. Н. Чувильдеев
chuvildeev@nifti.unn.ru

Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского, Нижний Новгород

Проектирование материалов – создание совокупности взаимосвязанных моделей, описывающих состав, структуру и свойства материалов, связь между составом, структурой и свойствами, а также моделей, описывающих процессы, позволяющие создать (изготовить) состав и структуру, обеспечивающие заданные (требуемые) свойства материала.

Рассмотрены основные типы моделей, описывающих в том числе состав, структуру и свойства материла, а также их изменение под воздействием внешних факторов (температуры, среды, облучения и т. д.), а также их взаимосвязь.

Проблема сопряжения моделей, разработанных на разных структурных уровнях, очевидно, является весьма нетривиальной и требует для каждой задачи отдельного рассмотрения. Один из подходов состоит в (1) выделении процесса, имеющего одинаковое «имя» на смежных структурных уровнях, (2) моделировании этого процесса на «первом» структурном уровне с целью определения его параметров, необходимых для моделирования на следующем структурном уровне, (3) использовании этих параметров для моделирования на следующем структурном уровне.

Необходимо отметить, что в зависимости от способа конечного использования, предъявляются различные требования к эксплуатационным, инженерным, технологическим свойствам, к свойствам поверхности, требования экономические, эргономические, а также к экологичности при производстве, эксплуатации и утилизации материала.

Описаны основные типы моделей, обозначены ключевые этапы проектирования материалов.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России (проект FSWR-2023-0037).

КОНСТРУКЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ ТЕРМОЯДЕРНЫХ РЕАКТОРОВ

А. В. Голубева
Golubeva_av@nrcki.ru

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва

ВЛИЯНИЕ ДЛИТЕЛЬНОГО ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО СТАРЕНИЯ НА МИКРОСТРУКТУРУ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МАЛОАКТИВИРУЕМЫХ АУСТЕНИТНЫХ СТАЛЕЙ

*И. Ю. Литовченко**[1,2], *Н. А. Полехина*[1], *С. А. Аккузин*[1], *К. В. Спиридонова*[1], *В. В. Осипова*[1,2], *А. В. Ким*[1,2], *В. М. Чернов*[3]

**litovchenko@ispms.ru*

[1]Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук, Томск

[2]Томский государственный университет, Томск

[3]Высокотехнологический научно-исследовательский институт неорганических материалов им. академика А. А. Бочвара», Москва

В качестве конструкционных материалов оболочек тепловыделяющих элементов и других элементов первой стенки реакторов в настоящее время используются хромоникелевые аустенитные стали системы Fe-(15-18)Cr-(15-25)Ni. Эти стали являются следующим поколением конструкционных материалов относительно сталей Х17Н14М2 (AISI 316) и 08Х18Н10Т (AISI 321), поскольку имеют более высокие значения жаропрочности и меньшую тенденцию к радиационному распуханию. Аустенитные стали, как немагнитные материалы, рассматриваются в качестве наиболее вероятных кандидатов для использования в гибридных энергетических установках. Одной из проблем хромоникелевых сталей является высокий уровень остаточной наведенной активности. Малоактивируемые хромомарганцевые аустенитные стали были предложены [1] в качестве альтернативы высокоактивируемым хромоникелевым. Наведенная активность таких сталей спадает за 50-100 лет до уровня, допускающего безопасное обращение. Однако стабильность аустенита хромомарганцевых сталей, разработанных ранее, уступала стабильности хромоникелевых сталей.

Авторы настоящего доклада разработали новые малоактивируемые аустенитные стали с повышенной стабильностью аустенита [2]. Начаты исследования термической стабильности микроструктуры и механических свойств новых сталей в условиях длительного (до 1000 ч) старения при 700 ºС в структурных состояниях после холодной деформации и термомеханических обработок. Показано, что зеренная и микродвойниковая структура в этих условиях остаются стабильными. Обнаружено выделение дисперсных карбидных частиц $M_{23}C_6$ (M – Cr, Mn, Fe) по границам зерен, внутри зерен, на частицах карбидов MC (M – Ti, V, Si, W) и на границах микродвойников. При длительных временах старения холоднодеформированного состояния обнаружена тенденция к выделению σ-фазы. Достигнутый комплекс прочностных и пластических свойств, разработанных новых малоактивируемых аустенитных сталей и их термическая стабильность, позволяют рассматривать эти стали в качестве перспективных малоактивируемых конструкционных материалов для энергетических реакторов нового поколения и гибридных установок.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-19-00802-П, https://rscf.ru/project/22-19-00802/ .

Литература

1. L. I. Ivanov, Y. M. Platov. Radiation Physics of Metals and Its Applications; Cambridge International Science Publishing: Cambridge, UK, 2004; p. 369. ISBN 1-898326-8-35.

2. I. Litovchenko et al. Metals. 13(12), (2023) 2015.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ИЗОТОПОВ ВОДОРОДА С БЕРИЛЛИЕМ. ОБЗОР

С. Л. Канашенко
serkanash@mail.ru

Научно-исследовательский институт биомедицинской химии им. В. Н. Ореховича, Москва

Сравнение экспериментальных данных растворения изотопов водорода в бериллии на примере кривых Swansiger, Шаповалова и др, дают повод усомниться в применимости уравнения Сивертса для описания накопления изотопов водорода в металлическом бериллии. Значение предэкспоненциального множителя в этом уравнении, полученного из экспериментов, оказалась существенно меньше, чем у остальных металлов, для которых растворимость водорода, надёжно подчиняются закону Сивертса. Это даёт возможность предположить, что накопление водорода в бериллии невелико, и во многом связано с наличием окисла BeO, который всегда присутствует в объёме металла.

Аномальное поведение кривой реэмиссии дейтерия при облучении бериллия, (Scherzer, Dorner) а именно, - что значение коэффициента реэмиссии при определённой дозе облучения, оказалось больше единицы, позволяет сделать предположение, что истинная растворимость водорода в бериллии крайне мала, а его выход на поверхность, вероятно, связан с процессом перколяции (просачивания) по кластеру дефектов или по системе газонаполненных пузырьков, которые получили выход на облучаемую поверхность металлов, после определённой дозы облучения.

Такая модель поведения водорода нашла прямое подтверждение в работах В. Н. Черникова и др., который зарегистрировал с помощью электронной микроскопии сеть лабиринтов в бериллии после его облучения ионами дейтерия.

В обзоре приведены экспериментальные и расчётные данные о поведении изотопов водорода, опубликованные за последние 20 лет.

СТРУКТУРА СПЛАВА V-15 NI ДО И ПОСЛЕ ИСПЫТАНИЙ НА ВОДОРОДОПРОНИЦАЕМОСТЬ

М. А. Мурзинова
mma@imsp.ru

Институт проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук, Уфа

В лекции, на примере системы V-Ni, кратко рассматриваются основные правила работы с диаграммами фазового равновесия двойных систем. Показано, как фазовая диаграмма может быть использована для прогнозирования структурного состояния после кристаллизации в неравновесных условиях, после гомогенизации и испытаний на водородопроницаемость. Наряду с положениями, изложенными в учебной литературе по физическому материаловедению для инженерных специальностей [1], в лекции представлены результаты структурных исследований сплавов системы V-Ni с содержанием Ni до 37 ат.% [2] и сплава V-15Ni в литом состоянии и после экспериментов на водородопроницаемость в интервале температур 350–500 °C [3].

Литература

1. D. Pelton. Thermodynamics and Phase Diagrams. In Physical Metallurgy 5th Edition, edited by D. E. Laughlin and K. H. Edition. Elsevier, 2014. P. 203–303.

2. E. R. Stevens, O. N. Carlson. Metallurgical Transactions. V. 1 (5), (1970) 1267.

3. Baraban A, Gabis I, Kozhakhmetov S, Murzinova M, Piven V, Sidorov N, et al. Int J Hydrogen Energy 44 (2019) 27492–8. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.08.224.

ЯВЛЕНИЯ В ДЕФОРМИРУЕМЫХ ИЗДЕЛИЯХ ТЕХНОЛОГИИ *SLM* ДЛЯ АТОМНОЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ

А. Н. Чуканов[1], В. А. Коротков [2], Е. В. Цой[1], А. А. Яковенко[3], Е. А. Чуканов[4]*
**alexchukanov@yandex.ru*

[1] Тульский государственный педагогический университет им. Л. Н. Толстого, Тула
[2]Тульский государственный университет, Тула
[3] ООО «Металлург-Туламаш», Тула
[4]Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва

Аннотация. Исследуются явления в процессе (in situ) деформации растяжением образцов технологии *SLM* (*selective laser melting*) из порошковых сплавов различной ориентации. На базе фотофиксации их деформации оценивали параметры анизотропии, неоднородности механических свойств, наблюдали волновой характер пластической деформации образцов. Высказаны гипотезы о природе перечисленных процессов.

Введение

Ответственные детали авиационной и ракетной техники, а также объектов атомной промышленности изготавливают из порошковых коррозионностойких и жаропрочных сплавов систем *Fe-Cr-Ni-Mo, Fe-Cr-Ni-Mo-Ti-V* с помощью технологий послойного лазерного плавления (*SLM*). Сплавы *SLM* (316*L*, ЭП648, *Inconel* 718) в ряде случаев превосходят характеристики ЧС-68, ЭК-164 для оболочек ТВЭЛов и деталей первой стенки реакторов. Однако, стабильность их свойств при жёстком температурно-силовом воздействии и контакте с продуктами ядерного синтеза, стимулирующими деградацию и водородную хрупкость, требует более подробного изучения. В ходе *SLM* формируется неравновесная структура, характеризующаяся неоднородностью и анизотропией механических свойств (прочности и пластичности). При нагружении в образцах возможно развитие волнового характера деформации, приводящего к фрагментации и разрушению.

Отсутствие информации об эволюции неоднородности и анизотропии свойств изделий *SLM* непосредственно в ходе (in situ) их деформации на склонность к фрагментации, радиационному распуханию, водородной стресс-коррозии тормозят их активное использование в качестве материалов реакторов поколения IV.

Цель работы. С помощью фотофиксации исследовать природу анизотропии, неоднородность механических свойств и наличие волнового характера деформации, развивающихся в процессе (in situ) растяжения образцов порошковых сплавов, изготовленных по технологии *SLM* в различной ориентации к платформе 3*d*-принтера.

Материалы и методики исследований. Объекты исследований – образцы (140х10х2мм±0,05)мм порошковых сплавов 316*L*, *Inconel* 718, ЭП648, *RS*-320 технологии *SLM* вертикальной и горизонтальной ориентации к платформе 3*d*-принтера *SLM* 280 2.0*H*. На поверхность образцов наносили делительную сетку с ячейками 1×1 мм. Ряд ячеек сетки рассматривали как поперечное сечение, начальные размеры которого известны. Образцы

подвергали одноосному растяжению (*Instron* 5982 и Р5-ПК) со скоростью перемещения захватов 5 мм/мин при 20 °С с записью машинной кривой растяжения (МКР). Одновременно с нагружением вели фотофиксацию (фотограмметрию) их поверхности. Анализируя цифровые изображения поверхности образцов, определяли деформации ячеек рядов делительной сетки, фиксировали их волновой характер, коэффициенты анизотропии (параметр Ланкфорда), параметры неоднородности и неравномерности деформации. По данным фотофиксации in situ начальных размеров ячеек исследованных сечений по ширине b_o и длине l_o и их мгновенных размеров b_k и l_k в сечении в процессе растяжения через интервал времени 10 сек определяли истинные деформации в поперечных сечениях, а также (в соответствии с условием неразрывности деформаций Сен-Венана), деформации по толщине $\varepsilon_{si} = -\varepsilon_{li} - \varepsilon_{bi}$. По ε_{si} находили мгновенные толщину s_i и площадь F_i исследованных поперечных сечений в зависимости от времени растяжения. Коэффициент анизотропии R в них рассчитывали по формуле: $R = \varepsilon_{bi}/(-\varepsilon_{li} - \varepsilon_{bi})$. Характер деформационного упрочнения в процессе растяжения определяли на основе анализа кривых упрочнения в координатах: интенсивность истинного напряжения – интенсивность истинной деформации. Истинные напряжения определяли отношением нагрузки, измеренной по МКР, к мгновенной площади поперечного сечения образца F_i. Для этого синхронизировали МКР и результаты фотофиксации с шагом 10 сек. Строили кривые упрочнения и методом наименьших квадратов определяли уравнения их линейной аппроксимации. Неоднородность материала оценивали на основе уравнений аппроксимации кривых упрочнения в различных поперечных сечениях образцов – показателем неоднородности материала по механическим свойствам при фиксированной деформации и показателем неравномерности пластической деформации материала при фиксированной интенсивности напряжений. Распределение и морфологию пор оценивали металлографическим, фрактографическим анализом (оптический, РЭМ), рентгеновской компьютерной томографией. Влияние пористости *SLM* на физико-механических свойства контролировали по результатам измерений внутреннего трения, модулей упругости 1-го и 2-го рода, ТКЛР. Порообразование в ходе *SLM* оценили имитационным моделированием в ПО *Kissam*. Напряжённо-деформированное состояние в окрестностях пор разной морфологии анализировали численным моделированием. На основе цифровой фиксации делительной сетки на поверхности испытуемого образца измеряли изменения длины каждой из ячеек в ходе испытаний. Строили зависимости их относительных деформаций ($\delta=(l_к-l_0)/l_0$) от длины образца и времени испытаний (t, сек).

Результаты исследований. Фотофиксация процесса растяжения позволяла с высокой точностью определять изменения коэффициента анизотропии (R), параметров неоднородности и неравномерности пластической деформации образцов в их локальных микрообъёмах непосредственно в процессе растяжения. При растяжении образцов исследованных сплавов выявили равномерный рост коэффициента анизотропии во всех поперечных сечениях, немонотонное увеличение неоднородности свойств материала с интенсивностью деформации и снижение неравномерности деформации с интенсивностью напряжения. *Волновой характер локальной пластической деформации.* При растяжении образцов *SLM* наблюдали формирование и движение в их объёме очагов локализованной пластичности. Их образование связывали с технологическими порами, являвшиеся концентраторами напряжений. Аккомодация внутренних напряжений в их окрестностях при растяжении провоцировала зарожде-

ние и распространение волновой деформации. Достоверности фиксации волновых спектров в исследованных сплавах подтвердила сходимость кусочно-линейных временных функций локальных деформаций при разложении их в ряд Фурье с последующей Фурье-интерполяцией. *Анализировали связь анизотропии свойств изделий SLM с их технологической пористостью* (газовыми порами (сферическими), вызванными неполнотой выхода газов из расплава при сплавлении порошка); порами непроплавления порошкового слоя (плоскими, перпендикулярными выращиванию). Установили, что различие (анизотропия) прочности и пластичности (10–15 %) вертикально и горизонтально ориентированных образцов исследованных сплавов, значительно превышает процент пористости (1–3 %) в них. Считали, что анизотропия не может быть связана только с масштабом пористости. Обосновали гипотезу о дополнительном факторе, влияющем посредством пористости на пластификацию при нагрузке вертикально выращенных образцов. Для её проверки *численным моделированием* в аппарате теории функций комплексных переменных анализировали распределение компонент тензора напряжений в окрестностях различных пор (цилиндр, сфера, двояковыпуклая линза). Функции распределения напряжений моделировали по аналогии с потенциальным обтеканием поверхности твёрдого тела идеальной жидкостью. Действующую силу заменяли скоростью частицы жидкости. При рассмотрении упруго напряжённого состояния металлической среды использовали термин «силовая линия» (аналог линии тока). Под ним понимали линию, касательная к которой в каждой её точке совпадает с направлением максимальной силы взаимодействия между соседними элементами среды. Ввели функции φ (потенциал) и ψ (аналог функции тока). Расчёт прогнозировал в окрестностях пор различной морфологии, являющихся локальными зонами концентрации напряжений, развитие при нагружении радиальных и кольцеобразных трещин. Образование этих свободных поверхностей порождало на границах пор зоны свободные от напряжений - зоны пластичности (ЗП). При растяжении образцов ЗП активно развиваются у плоских пор в образцах вертикальной ориентации, приводя к росту их пластичности и снижению прочности. Численное моделирование подтвердило факт наличия ЗП, прилегающих к поверхности плоских пор вертикальных образцов и выявило связь их размеров с морфологией пор и внешним напряжением. В ходе моделирования ЗП выполнили расчет координат границ ЗП с учетом продольного размера поры (l = 10; 50; 100 мкм) и заданных условий процесса растяжения ($\beta = \sigma_{0,2} / \sigma_{вн.}$). *Имитационное моделирование порообразования в ПО Kissam* выявило сильную зависимость пористости от стратегии сканирования (последовательная, зиг-заг). Моделирование слоя показало, что избыточное расстояние между соседними треками (*hatch space*) в последовательной стратегии приводит к их неполному сплавлению и образованию пор между ними. Моделирование срезов поверхностей, карт глубин и высот наплавления подтвердило связь пористости с несплавлением соседних треков. Расчет прогнозировал малое количество газовых (сферических) пор, по краям штриховки в начальных сегментах дорожек и повышенную плотность плоских пор на их срезах. Моделирование подтвердило возможность формирования ЗП в окрестностях плоских пор в вертикальных образцах. Наблюдение пористости в исследованных образцах различной ориентации методом *рентгеновской компьютерной томографии* в системе *General Electric v/tome/x m300* полностью подтвердили результаты имитационного моделирования. *Фрактографическое исследование* поверхностей изломов образцов после разрушения на различном расстоянии от «шейки» показали, что излом горизонтальных образцов обоих сплавов демонстрирует хрупкое разрушение, в то время как из-

ломы вертикальных образцов демонстрируют рельеф, характерный для хрупко-вязкого и вязкого разрушения. Это связывали с активацией у вытянутых пор зонах пластичности и их перколяцией.

Заключение

1. Разработана методика оценки коэффициента анизотропии, параметров неоднородности механических свойств и неравномерности деформации анизотропных материалов непосредственно в ходе их растяжения, базирующаяся на статистическом анализе кривых упрочнения, полученных фотограмметрией (фотофиксацией) делительной сетки.

2. Установлено, что при одноосном растяжении образцов исследованных сплавов (до локализации) деформации по объёму аппроксимируются линейными зависимостями. Т. е. пластическая деформация материала в трёх ортогональных направлениях равномерна. Это позволяет расчётным путём находить изменение in situ размеров образца в любом поперечном сечении и устанавливать степень его изотропности по механическим свойствам.

3. На основе параметров кривых упрочнения, интенсивности истинных напряжений и деформаций, рассчитанных при синхронизации процесса фотофиксации с параметрами МКР, получены выражения и выполнен расчёт показателя неоднородности материала по напряжению и деформации.

4. Образцы исследованных сплавов имели неоднородность механических свойств, минимальную в начале растяжения и возраставшую с увеличением интенсивности деформации.

5. Установлена связь (рост) показателя неоднородности механических свойств образцов исследованных сплавов от интенсивности деформации и снижение показателя неравномерности их пластической деформации с ростом интенсивности напряжений.

6. Фотофиксация и анализ зависимостей локализованной деформации при растяжении образцов технологии *SLM* позволили зафиксировать волновой характер процесса их пластической деформации. Впервые была выявлена стадийность зафиксированного волнового спектра изделий *SLM*. Выявлено наличие общих особенностей волновых процессов в изделиях аддитивного производства (*SLM*), слитковых и монокристаллических материалах.

7. Разработанная методика может быть использована для физически обоснованного анализа in situ связи параметров механизмов упрочнения/разупрочнения в локальных микрообъёмах анизотропных изделий (проката, аддитивных технологий (*SLM, MIM*, *FDM*)) с параметрами анизотропии и неоднородности свойств, влияющими на фрагментацию и разрушение элементов реакторов, а также при разработке технологии их производства.

Благодарности. Представленные результаты получены при финансовой поддержке грантов: Российского научного фонда № 23-29-00433 (https://rscf.ru/project/№ 23-29-00433/); правительства Тульской области №№ ДС/126, ДС/136.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ВОДОРОДА С АКТИВНЫМ КОМПОНЕНТОМ В КАТАЛИТИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЯХ

О. В. Нецкина
netskina@catalysis.ru

Институт катализа им. Г. К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук, Новосибирский Академгородок

Каталитические превращения с участием водорода лежат в основе многих промышленных процессов [1–3], например, получения аммиака, гидрирования растительных масел, очистки терефталевой кислоты, гидроочистки нефтяных фракций, метанирования CO_2 и т. д. Спектр этих процессов расширяется в связи с наметившейся тенденцией перехода на углерод-нейтральные технологии [4], где одна из значимых ролей отводится водороду [5]. В первую очередь активно ведутся работы по разработке катализаторов для эффективной активации молекулярного водорода при его электрохимическом окислении в топливных ячейках, в гидрировании жидких органических носителей водорода, в гидрировании непищевого масложирового сырья. Не менее значимой задачей является создание каталитических систем, обеспечивающих образование молекулы водорода при разложении аммиака, гидролизе и термолизе гидридных соединений, дегидрировании органических соединений. Все вышеперечисленные процессы имеют общую стадию, где водород в какой-либо форме связан с каталитически активной поверхностью. При этом маршруты его превращения зависят не только от природы реагентов и условий процессов, но и от состава катализатора, состояния активного компонента, типа кристаллографической грани на его поверхности, природы функциональных групп и т. д. [6]. Следует отметить, что полученные знания о влиянии этих факторов на механизм химических превращений дают еще один инструмент целенаправленного управления скоростью реакций с участием водорода за счет подбора катализаторов с заданными характеристиками активного компонента и оптимальным составом поверхностных функциональных групп носителя.

Автор выражает благодарность Министерству науки и высшего образования РФ за финансовую поддержку исследований (проект FWUR-2024-0034).

Литература

1. A. I. Amhamed, et al., Fuels. 3 (2022) 408-435.
2. J. W. Veldsink, et al., Catalysis Reviews - Science and Engineering. 39 (1997) 253–318.
3. F. A. Duarte, et al., Fuel 90 (2011) 2158-2164.
4. L. Shang, et al., J. Clean. Prod. 499 (2025) 145241.
5. H. Singh, et al., Energy Advances 1 (2022) 580-605.
6. C. Vogt, et al., Nat. Commun. 10 (2019) 5330.

ИСТОЧНИКИ ИЗОТОПОВ ВОДОРОДА ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ НА ОСНОВЕ ГИДРИДА ВАНАДИЯ

А. Н. Голубков

Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики, Саров

Для исследования многих процессов с участием водорода требуются источники высокого давления этого газа. Они нужны, например, для увеличения скорости взаимодействия вещества с водородом или синтеза новых соединений. Для исследования некоторых процессов требуются, в том числе, и источники радиоактивного трития, создающие высокое давление. В качестве примера можно сказать, что в области мюонного катализа ядерных реакций синтеза рассматривается возможность проведения реакции взаимодействия дейтерия и трития при давлениях в мишени до 500 МПа.

Кроме подачи изотопов водорода высокого давления к этим источникам предъявляется ряд дополнительных требований. В первую очередь это высокая надёжность и безопасность, особенно при работе с тритием, чистота подаваемого газа, возможность плавной регулировки давления, минимальные габариты и простота в обращении. По нашему мнению, наиболее полно предъявляемым требованиям удовлетворяют термодесорбционные источники водорода на основе гидридов металлов. И одним из наиболее перспективных гидридов металлов для получения давления водорода более 100 МПа является гидрид ванадия.

В работе приведены сведения, необходимых для создания источников водорода на основе ванадия, начиная от условий синтеза гидрида и кончая конструкцией источников, как для не радиоактивных изотопов водорода, так и для трития. Для трёх изотопов водорода представлены сведения о необходимых температурах нагрева источника для получения требующегося давления газа.

ИМИТАЦИОННЫЕ ОБЛУЧЕНИЯ КАК СПОСОБ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ НЕЙТРОННЫХ ПОВРЕЖДЕНИЙ ПЕРСПЕКТИВНЫХ МАТЕРИАЛОВ ТЯР

А. В. Спицын, Н. П. Бобырь*
**Spitsyn_av@nrcki.ru*

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва

Важным фактором, влияющим на свойства конструкционных и функциональных материалов ядерных и термоядерных реакторов, является изменение их структуры под действием нейтронного облучения. Под действием нейтронного облучения образуются дефекты структуры, а также новые элементы – водород, гелий и другие осколки реакций.

Из-за сложностей моделирования процессов взаимодействия нейтронов с материалами, особенно если материалы имеют в составе большое количество элементов, необходимо проводить экспериментальные исследования изменения свойств материалов под нейтронным облучением. При этом исключительно важным является учёт влияния энергетического спектра нейтронов, которые воздействуют на материалы, в том числе из-за того, что сечения ряда процессов имеют резонансный характер. И если сложностей с облучением экспериментальных образцов материалов ядерной энергетики не возникает ввиду доступности ядерных реакторов с требуемым энергетическим спектром нейтронов, в том числе исследовательских, то исследование материалов для термоядерных реакторов, в том числе исследование взаимодействия с дефектами структуры термоядерного топлива – изотопов водорода, вызывает больше сложностей из-за отсутствия интенсивных источников термоядерных нейтронов, которые должны иметь энергию 14,1 МэВ.

Интенсивность существующих источников термоядерных нейтронов не превышает 1×10^{11} н/с, что на несколько порядков ниже, чем ожидаемые потоки в термоядерных реакторах. В настоящий момент проектируются источники термоядерных нейтронов на D-T реакции, где нейтроны образуются в результате взаимодействия ускоренных пучков дейтерия с мишенью, содержащей атомами трития, которые, впрочем, не обещают интенсивность, сравнимую с термоядерными реакторами. Также в Испании строится источник нейтронов *IFMIF-DONES* [1] с реакцией D-Li со схожим спектром быстрых нейтронов и плотностью потока до 1×10^{18} н/с·см^2. Однако даже *IFMIF-DONES* имеет заметные отличия энергетического спектра нейтронов, что означает, что первый релевантный источник для испытаний термоядерных материалов будет термоядерный источник нейтронов на базе токамака.

В связи с недоступностью в настоящий момент интенсивного источника нейтронов с термоядерным спектром для экспериментального моделирования воздействия термоядерных нейтронов на материалы используются альтернативные способы: источники нейтронов с более мягким спектром, ускорители тяжёлых ионов для создания дефектов структуры, ускорители лёгких ионов для внедрения атомов лёгких газов, метод «тритиевого трюка» [2] для равномерного насыщения материала радиогенным гелием. Тем не менее все перечисленные методы имеют свои ограничения, а также каждый из методов не моделируют полный спектр факторов воздействия нейтронов на материалы, не обеспечивает их синергию, что необходимо учитывать при интерпретации получаемых результатов.

Литература

1. https://ifmif-dones.es/ .
2. ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез, 2013. Т. 36. Вып. 3.

КОРОТКОЦИКЛОВОЕ ОТДЕЛЕНИЕ ОТ НЕ И РЕЦИРКУЛЯЦИЯ D/T С ПОМОЩЬЮ СВЕРХПРОНИЦАЕМЫХ МЕМБРАН В УСТАНОВКАХ УТС

*А. И. Лившиц, А. О. Буснюк**
**busnyuk@sut.ru*

Санкт-Петербургский государственный университет телекоммуникаций
им. проф. М. А. Бонч-Бруевича, Санкт-Петербург

При работе УТС в результате термоядерных реакций будет происходить образование гелия. Кроме того, взаимодействие плазмы с первой стенкой, диверторными пластинами и другими конструкционными элементами вакуумной системы приведет к появлению газообразных примесей. Присутствие атомов гелия и примеси в плазме, вызывает ее охлаждение, препятствуя тем самым протеканию термоядерных реакций. Поэтому, для поддержания концентрации гелия и примесей на допустимом уровне требуется их постоянная откачка. Поскольку в настоящее время не существует способов эффективной селективной откачки гелия, изотопы водорода также приходится откачивать, с последующим их отделением для дальнейшего использования.

Согласно существующей в настоящее время концепции откачки проектируемых или строящихся УТС, например, ИТЕР, для получения требуемой скорости удаления гелия предполагается использовать крионасосы. Одновременно с гелием при такой системе эвакуации газа на криопанелях будет намораживаться D/T смесь. Недостатки такого способа откачки очевидны.

Во-первых, намораживание большого количества дорогостоящего трития на криопанелях увеличивает общее его количество в топливном цикле. Во-вторых, существует опасность радиационного выброса при аварийном размораживании крионасоса. В-третьих, по мере насыщения криопанелей предполагается производить их периодическое размораживание с перекрытием вакуумным вентилем большого диаметра, т. е. подвижных частей, уменьшающих надёжность системы.

Возможное решение проблемы заключается в селективном выделении D/T смеси из дивертерного выхлопа с помощью сверхпроницаемых по водороду и непроницаемых для гелия мембран (СПМ) [1–4], расположенных вдоль стенок, имеющихся в УТС откачных вакуумпроводов. Большая часть D/T смеси, очищенной от примесей, будет возвращаться в непрерывном режиме в топливный цикл, минуя тритиевый завод, что значительно снизит содержание трития в топливном цикле. СПМ способны не только эффективно откачивать изотопы водорода и очищать их от примесей, но и сжимать на несколько порядков величины, облегчая их дальнейшую транспортировку.

Для реализации явления сверхпроницаемости необходимо соблюдение ряда условий, одним из которых является наличие энергии (химической или кинетической) у водородных частиц, превышающей тепловую на величину масштаба 1 эВ. Тепловой атомарный водород является примером таких частиц, которые, с одной стороны, с высокой вероятностью растворяются в материале мембраны, а с другой стороны, не распыляют монослой примесей на поверхности СПМ, наличие которого является ещё одним условием сверхпроницаемости.

В работе приводится краткий обзор работ, посвящённых изучению возможности использовать СПМ в УТС и описываются результаты экспериментов, полученных на мем-

бранной установке, с атомизацией водорода на раскалённой поверхности прямонакально нагреваемых танталовых лент. Демонстрируется эффективная откачка изотопов водорода, компрессия и отделение от He и Ar в условиях близким к ожидаемым в УТС.

Литература

1. Алимов В. Н., Буснюк А. О., Кузенов С. Р., Передистов Е. Ю., Лившиц А. И. Взаимодействие изотопов водорода с конструкционными материалами / Под ред. А. А. Юхимчука (РФЯЦ−ВНИИЭФ, Саров, 2023), с. 10–37. DOI: 10.53403/9785951505378_ 2023_10.

2. C. Day, B. Butler, T. Giegerich, P.T. Lang, R. Lawless, B. Meszaros, Fusion Eng. Des., 109-111 (Pt A), 299 (2016). DOI: 10.1016/j.fusengdes.2016.03.008.

3. Карпов Д. А., Иванов А. Г., Лившиц А. И., Драничников А. Н. Физика плазмы, 47 (12), 1152 (2021). DOI: 10.31857/S0367292121120027 [D.A. Karpov, A.G. Ivanov, A.I. Livshits, A.N. Dranichnikov, Plasma Phys. Rep., 47, 1267 (2021). DOI: 10.1134/S1063780X21120023].

4. C. Li, A.J. Job, T.F. Fuerst, M. Shimada, J.D. Way, C.A. Wolden, J. Nucl. Mater., 582, 154484 (2023).

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДОВ РАЗДЕЛЕНИЯ ИЗОТОПОВ ВОДОРОДА ДЛЯ ДЕТРИТИЗАЦИИ СБРОСОВ И ВЫБРОСОВ АЭС

М. Б. Розенкевич, А. Н. Букин, С. А. Марунич, В. С. Мосеева, Ю. С. Пак*
**rozenkevich.m.b@muctr.ru*

Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, Москва

Согласно данным, опубликованным в техническом докладе МАГАТЭ в 2024, эксплуатация 442 (по данным на 2021 год) энергетических ядерных реакторов в мире приводит к значительным выбросам трития в окружающую среду как в виде газа, так и в виде воды. Например, при суммарной электрической мощности всех тяжеловодных энергетических ядерных реакторов в мире около 24 ГВт ежегодные выбросы трития в виде воды достигают 40 г, что дает заметный вклад в количество трития, образующегося на Земле естественным путем (200–250 г/год). Ядерная энергетика России основана на легководных реакторах, выбросы трития на которых значительно меньше. По данным того же источника около 300 легководных реакторов типа PWR в мире с общей мощностью около 290 ГВт выбрасывают в окружающую среду около 4 г тритированной воды. На АЭС с ВВЭР-1000 объем дебалансных вод после системы водоочистки составляет в среднем 30 т/месяц При этом удельная активность трития в ней может превышать 10^6 Бк/кг, что в соответствии с российскими нормативами означает, что такая вода относится к жидким радиоактивным отходам, и ее сброс в водные объекты запрещен. Проблема состоит в том, что при больших объемах такой воды концентрация трития в ней мала и его извлечение с целью доведения до разрешенного к сбросу уровня концентрации не приведет к получению заметного количества, позволяющего считать его товарным продуктом. Поэтому обращение с такими ЖРО сводится к разрешению противоречия между экологическими и экономическими требованиями.

В настоящем докладе проводится обзор современных методов удаления трития из выбросов и сбросов объектов, оперирующих с большими количествами трития, с акцентом на возможность их применения на российских АЭС. Что касается выбросов, то наиболее распространенным способом очистки газов от трития является каталитическое окисление всех водородсодержащих веществ до воды с последующим удалением тритированных паров воды методами адсорбции или фазового изотопного обмена. Для очистки водных потоков используются технологии ректификации или химического изотопного обмена водорода с водой. В частности, приводится пример использования последнего метода для детритизации сбросов Ленинградской и Балаковской АЭС.

БЕЗОПАСНОСТЬ ПРИ ПРОЕКТИРОВАНИИ СИСТЕМ ОБОРОТА ИЗОТОПОВ ВОДОРОДА

С. С. Ананьев
Ananyev_SS@nrcki.ru

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва
Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва
Национальный исследовательский университет «МЭИ», Москва

Разработка и проектирование установок управляемого термоядерного синтеза (УУТС) в РФ предусмотрено действующей федеральной программой «Разработка технологий управляемого термоядерного синтеза и инновационных плазменных технологий», реализуемой с 2021 года. Согласно разрабатываемым предложениям к Федеральному закону № 170-ФЗ «Об использовании атомной энергии» в УУТС должны соблюдаться требования для безопасной эксплуатации, характерные для объектов использования атомной энергии (ОИАЭ). Экспериментальные физические и демонстрационные установки предполагают использование тяжелых изотопов водорода в качестве компонентов топлива. Следовательно, действующие и, в особенности, проектируемые установки, содержащие на своей площадке тяжелые изотопы водорода, должны рассматриваться как УУТС и соответствовать нормам для ОИАЭ.

В УУТС может содержаться большое количество трития по сравнению с предельно допустимыми количествами, разрешенными действующими нормативными документами, при этом его выбросы в окружающую среду строго регулируются законом и должны быть довольно низкими. Чтобы защитить персонал, население и окружающую среду от воздействия трития, очень важно надежно ограничить его проникновение из топливного цикла в рабочие помещения и окружающую среду. Для обеспечения радиационной безопасности УУТС радиологический контроль и защита от трития и активированных нейтронным облучением материалов является важнейшим вопросом. При работе установки будут образовываться различные виды отходов, загрязненных тритием, необходимо уделять особое внимание при обращении с ними.

В данном докладе рассмотрены принципы организации работ с тяжелыми изотопами водорода на УУТС. Проведена оценка безопасности топливного цикла УУТС. Основное внимание уделялось запасам трития, которые могут быть высвобождены из взаимосвязанных систем топливного цикла. Рассмотрены последовательности аварийных ситуаций, возникающих в результате отказа компонентов. Оценка в основном была сосредоточена на единичном отказе в сочетании с невозможностью его изолировать или устранить. Существует вероятность того, что одно событие может привести к отказу как границы процесса, так и второй границы сдерживания. Такие события выходят за рамки проектных аварий и рассматриваются только для оценки степени воздействия на окружающую среду. Проведенный анализ можно отнести как к УУТС реакторного уровня, так и к экспериментальным физическим установкам для изучения физики плазмы и УТС.

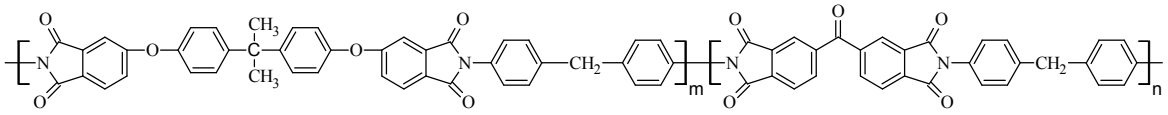
Исследование выполнено в рамках научной программы Национального центра физики и математики, направление № 8 «Физика изотопов водорода».

ГАЗОРАЗДЕЛИТЕЛЬНЫЕ СВОЙСТВА МЕМБРАН НА ОСНОВЕ ПОЛИЭФИРИМИДОВ СОПОЛИМЕРНОГО СТРОЕНИЯ

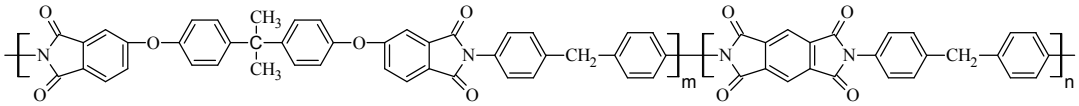
А. В. Варежкин
varezhkin.a.v@muctr.ru

Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, Москва

Цель исследования – разработка полимерного мембранного материала для выделения водорода из газовых смесей. Синтезированы 2 линейки полиэфиримидов сополимерного строения: линейка с лабораторной маркировкой МАБ



и линейка МАП



Линейка МАБ синтезирована поликонденсацией 4,4′-диаминодифенилметана (МДА) со смесью диангидридов бисфенола-А (БФАДА) и 3,3′,4,4′-бензофенонтетракарбоновой кислоты (БФДА). Линейка МАП синтезирована поликонденсацией МДА со смесью диангидридов пиромеллитовой кислоты (ПМДА) и БФАДА.

Для исследования газоразделительных свойств были отлиты пленки из полимеров, в которых содержание жесткоцепного диангидрида не превышало 30 % моль. Результаты тестирования пленок представлены в таблице 1.

Таблица 1

Сравнительные газоразделительные свойства синтезированного полимера МАБ 90/10 и промышленного Ultem 1000 (*) – лабораторный образец, **) – литературные данные)

Показатель	Unit	Gas	Материал мембраны		
			Ultem 1000*	Ultem 1000**)	МАВ 90/10
Коэффициент проницаемости, P	Barrer	H_2	6,22	6,53	16,0
		He	5,49	-	14,7
		N_2	0,05	0,05	0,11
Селективность, α		H_2/N_2	124	130	134
		He/N_2	115	-	123

1 Баррер = $1\cdot10^{-10}\cdot см^3$(н.у.)$\cdot см\cdot см^{-2}\cdot$(см·рт.ст.)$^{-1}$

Полимер МАБ 90/10 показал одинаковую селективность при разделении пары газов H_2/N_2 по отношению к промышленному полимеру Ultem1000, но при этом его проницаемость по водороду выше в 2,5–2,8 раз.

Исследование выполнено в рамках научной программы Национального центра физики и математики (проект 8 «Физика изотопов водорода», направление 8.1 «Исследования в области взаимодействия водорода с твердым телом».

УСТАНОВКИ СИСТЕМ ТРИТИЕВОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ. ОБЩИЕ ПОДХОДЫ И ПРИНЦИПЫ РАБОТЫ

Р. К. Мусяев

Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики, Саров

Рассматриваются общие подходы при разработках экспериментальных установок для работы с тритием и инфраструктуры специализированных систем тритиевого обеспечения (СТО) на примерах исследовательских комплексов РФЯЦ-ВНИИЭФ. В докладе приведены принципы работы отдельных составных частей СТО и их дальнейшее технологическое развитие.

ВОДОРОДНАЯ ХРУПКОСТЬ КОНСТРУКЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ БАЗА ДЛЯ ЕЁ ИССЛЕДОВАНИЯ

И. П. Максимкин

Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики, Саров

Одним из ключевых факторов, снижающих эксплуатационные свойства конструкционных материалов (КМ), работающих в среде изотопов водорода (ИВ), является водородное охрупчивание (ВО). Поскольку нет единой общей теории или модели ВО, исследования взаимодействия ИВ с КМ является весьма актуальной задачей, так как только на их основании можно дать рекомендации по выбору КМ, величинам допустимых напряжений в силовых элементах конструкций, времени безопасной эксплуатации и т. д. Предрасположенность к ВО и механизм ВО для каждого металла или сплава имеют свою специфику, обусловленную особенностями взаимодействия с водородом для каких-то конкретных условий (температура, давление, время воздействия, уровень напряжений, наличие концентраторов напряжений и т. д.). Поэтому для оценки водородостойкости конструкционных материалов (КМ) требуется проведение специальных экспериментов и исследований и соответствующего оборудования.

В докладе представлена общая информация по вопросу водородного охрупчивания КМ, описаны подходы и экспериментальная база РФЯЦ-ВНИИЭФ, предназначенная для исследования взаимодействия ИВ с КМ.

ЗАХВАТ И ПРОНИКНОВЕНИЕ ДЕЙТЕРИЯ СКВОЗЬ МАЛОАКТИВИРУЕМУЮ ХРОМОМАРГАНЦЕВУЮ АУСТЕНИТНУЮ СТАЛЬ С ПОВЫШЕННЫМ СОДЕРЖАНИЕМ КАРБИДНЫХ ЧАСТИЦ

А. В. Голубева[1*], *Т. А. Шишкова*[1], *И. Ю.*[2] *Литовченко, А. П. Персианова*[1], *Н. О. Степанов*[1], *А. Е. Алёшин* [3], *Д. А. Козлов*[1], *Д. И. Черкез*[1], *В. М. Чернов*[4]

**Golubeva_av@nrcki.ru*

[1]Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва
[2]Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения РАН, Томск
[3]Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва
[4] Высокотехнологический научно-исследовательский институт неорганических материалов им. А. А. Бочвара, Москва

Новая малоактивируемая хромомарганцевая сталь (МААХМС) [1] была недавно разработана в России как потенциальный конструкционный материал ядерных и термоядерных установок. Захват и перенос изотопов водорода в материалах термоядерных реакторов – весьма важный аспект обеспечения их безопасности. Взаимодействие изотопов водорода смалоактивируемыми аустенитными хромомарганцевыми сталями этого класса ранее не исследовалось.

В работе представлены результаты исследования захвата и проникновения дейтерия сквозь новую сталь. Объект настоящего исследования – плавка №4 МААХМС с повышенным содержанием карбидных частиц. Захват дейтерия в МААХМС исследовали при взаимодействии с газом и при облучении дейтериевой плазмой. Часть образцов была облучена дейтериевой плазмой в течение 14 часов при температуре 200 °С до дозы 10^{25} D/м^2, вытягивающий потенциал составлял 100 эВ. Часть образцов насыщалась в газообразном дейтерии при давлении 5 атмосфер и при той же температуре в течение 24 часов. Захват дейтерия в МААХМС был исследован методом термодесорбционной спектроскопии при скорости нагрева образца 0.5 К/с.

При насыщении из газа захват дейтерия в МААХМС сравним с захватом в малоактивируемую ферритно-мартенситную сталь ЭК-181. После плазменного облучения образцы стали МААХМС захватывают в 20 раз большее количество дейтерия, чем образцы ЭК-181 при тех же условиях. Результаты могут быть объяснены более медленным переносом водорода в МААХМС.

Также исследовали проницаемость МААХМС при взаимодействии с газообразным дейтерием в диапазоне температур мембраны 250–350 °С. Исследуемая мембрана разделяла две высоковакуумные камеры, в первую из которых напускали дейтерий до давления 10–500 мбар. Поток дейтерия, проникшего сквозь мембрану, регистрировали во второй камере при помощи квадрупольного масс-спектрометра.

По проведённым оценкам, коэффициент диффузии дейтерия в стали МААХМС в 20 раз ниже, чем никелевых аустенитных сталях и на 3,5 порядка ниже, чем в стали ЭК-181.

Исследование выполнено в рамках Государственного контракта НИЦ «Курчатовский институт».

Плавка № 4 стали МААХМС осуществлена по заказу НИЦ «Курчатовский институт».

Литература

1. Литовченко И. Ю., Полехина Н. А., Аккузин С. А. и др. Малоактивируемая хромомарганцевая аустенитная стали / Патент на изобретение № RU 2821535 C1. Россия. 2024 г.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОДОРОДОПРОНИЦАЕМОСТИ С ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНО ЗАВИСИМЫМ КОЭФФИЦИЕНТОМ ДИФФУЗИИ И ДИНАМИЧЕСКИМИ ГРАНИЧНЫМИ УСЛОВИЯМИ

*Ю. В. Заика, Н. И. Родченкова**
**nirodchenkova@krc.karelia.ru*

Институт прикладных математических исследований Карельского научного центра РАН, Петрозаводск

Интерес к взаимодействию изотопов водорода с конструкционными материалами вызван, в частности, проблемами защиты от водородной коррозии и перспективами водородной энергетики. Рассматривается нелинейная краевая задача, соответствующая следующему эксперименту. Нагретая до достаточно высокой температуры мембрана служит перегородкой вакуумной камеры. После предварительного вакуумирования на входной стороне создается постоянное давление газообразного водорода. С выходной стороны в условиях вакуумирования определяется проникающий поток.

Нарастание концентрации растворенного атомарного водорода до определенного уровня приводит к существенному замедлению диффузии. В таких условиях принята экспоненциальная модель зависимости коэффициента диффузии от концентрации. По температуре зависимость в соответствии с законом Аррениуса. Такие задачи хорошо изучены, но в рамках стандартных граничных условий. На выходной стороне в приповерхностном объеме принимается нулевая концентрация диффузанта. На входе обычно считается, что практически мгновенно (при относительно большом давлении) концентрация достигает локально равновесного уровня, пропорционального корню из давления (закон Сивертса).

Существенным недостатком такой модели является то, что из рассмотрения исключается динамика поверхностных процессов растворения и сорбции-десорбции. В представленной работе эти процессы учтены в форме нелинейных динамических граничных условий. Производная по времени участвует не только в диффузионном уравнении, но и в граничных условиях. Это существенно усложняет краевую задачу.

В работе представлен итерационный вычислительный алгоритм решения нелинейной краевой задачи на основе неявных разностных схем и приведены результаты численного моделирования. После верификации модели можно уже численно моделировать различные ситуации (например, реакцию на скачкообразный ступенчатый характер входного давления), экономя на экспериментальных затратах.

ОЦЕНКА ПОВЕРХНОСТНЫХ ПАРАМЕТРОВ ТЕРМОДЕСОРБЦИИ ВОДОРОДА ИЗ КОНСТРУКЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ МЕТОДОМ СОПРЯЖЕННЫХ УРАВНЕНИЙ

*Ю. В. Заика, Е. К. Костикова**
**kostikova@krc.karekia.ru*

Карельский научный центр Российской академии наук, Петрозаводск

Интерес к взаимодействию изотопов водорода с конструкционными материалами вызван, в частности, проблемами защиты от водородной коррозии и перспективами водородной энергетики (термоядерной – в отдаленной перспективе). Одним из эффективных экспериментальных методов является термодесорбционная спектрометрия (ТДС). Образец, предварительно насыщенный растворенным водородом при достаточно высокой температуре, медленно (на практике обычно линейно) нагревается в вакуумной камере. С помощью масс-спектрометра определяется поток дегазации. Зависимость потока от текущей температуры дает спектр термодесорбции. По этой информации судят о тех или иных характеристиках конструкционного материала, взаимодействующего с водородом. Спектр часто состоит из нескольких изолированных пиков. Их интерпретация и составляет задачу анализа спектра.

Обычно применяют следующую схему. Спектр разлагают на сумму гауссианов. Каждый из них интерпретируют как реакции первого или второго порядков, оперируя средней по объему концентрацией водорода и энергиями связи в различного рода ловушках (микрополости, границы зерен и другие неоднородности). Затем с помощью методики Киссинджера оценивают предэкспоненты (частотные множители) и энергии связи.

Численное моделирование показывает, что возможен и другой сценарий. Для определенности будем иметь в виду дегазацию тонкой пластины. Сначала по мере нагрева происходит десорбция с поверхности и из приповерхностного объема (первый пик). Температура растет, и у поверхности сформирован большой градиент концентрации. Происходит существенная активизация диффузии из объема к поверхности, и наблюдается повторный всплеск дегазации.

В работе рассматривается нелинейная диффузионная краевая задача с динамическими граничными условиями для поверхностной концентрации (с производной по времени). Это приводит к появлению производных дробного порядка, что характерно для так называемых динамических систем с памятью.

Для численного моделирования (не только термодесорбции, но и водородопроницаемости при различных внешних условиях) необходимы оценки параметров модели. Это уже обратные задачи математической физики, решение которых требует более сложного математического аппарата, чем при решении прямых задач. Для определения коэффициента диффузии отработаны разнообразные методики, как экспериментальные, так и теоретические. С поверхностными параметрами (адсорбции, десорбции, растворения в объеме) значительно сложнее, поскольку они существенно зависят даже от методики предварительной подготовки образцов.

В работе представлен алгоритм оценки поверхностных параметров по результатам ТДС-эксперимента. Для получения необходимых соотношений используется теория сопряженных уравнений математической физики.

ВОДОРОДОПРОНИЦАЕМОСТЬ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ МЕТАЛЛОВ V, Nb, TaиPd

С. К. Кожахметов[1], *Н. И. Сидоров*[2*], *И. Е. Габис*[3], *В. А. Пивень*[4], *В. И. Игнатьева*[2], *В. П. Ченцов*[2]

**n_sidorov@mail.ru*

[1]Ассоциация материаловедения и нанотехнологий, Караганда
[2]Институт металлургии им. Н. А. Ватолина Уральского отделения РАН, Екатеринбург
[3]Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург
[4]Краснодарское высшее военное авиационное училище летчиков им. Героя Советского Союза А. К. Серова, Краснодар

Металлы 5-й группы, ванадий, ниобий и тантал, представляют особый интерес для исследователей как из-за потенциальных параметров водородной проницаемости, так и из-за относительно низкой цены.

Анализ исследования [1] показывает, что при одинаковых условиях, таких как давление водорода 7 бар и температура 673К, расширение кристаллической решетки Nb и Ta меньше, чем у Pd. Значение параметра решетки сплава Nb-Ta не зависит от состава, поскольку параметры решетки обоих металлов идентичны. Растворимость водорода в $Ta_{70}Nb_{30}$ (ат. % ат.) является самой высокой, как указано в статье [2]. Частичное замещение атомов Nb атомами Ta незначительно влияет на механические свойства, растворимость водорода и проницаемость. Более низкая температура образования гидрида металлов Ta (283 К), V (443 К) и Nb (444 К) является дополнительным преимуществом по сравнению с Pd и Pd-Ag. С экономической точки зрения, производство мембранных систем на основе Ta-Nb может быть более предпочтительным чем Pd и система Pd-Ag, так как тантал является естественной примесью Nb, что снижает затраты на получение сплавов Ta-Nb.

В работе представлен анализ водородопроницаемости сплавов на основе металлов V группы по сравнению со сплавами B1 (в весовых %: Ag 15.2-16.8, Au 1.3-2.1, Ru 0.4-1.1, Pt 0.4-1.1, Al 0.08-0.2, Pd- остальное) и Pd-6In-0.5Ru в рабочем интервале температур 350–450 °C.

Литература

1. Dolan M. D. Non-Pd BCC alloy membranes for industrial hydrogen separation // J. Membr. Sci. 362 (2010) 12–28.

2. Westlake D. G., Miller J. F. Terminal Solubility of hydrogen in Nb-Ta alloys and characterization of the solid solutions. J. Less-Common Met. 65 (1979) 139-154.

МЕХАНИЗМЫ ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ ДЕФОРМАЦИИ ПРИ УДАРНОМ НАГРУЖЕНИИ МЕДИ

Н. В. Мелёхин

melehin@nifti.unn.ru

Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского, Нижний Новгород

ПЛАНЫ РАБОТ ПО МОДЕЛИРОВАНИЮ ЗАХВАТА ВОДОРОДА В ИЯФ СО РАН

В. А. Попов, Е. И. Кузьмин*
v.a.popov94@gmail.com

Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера Сибирского отделения РАН,
Новосибирский Академгородок

Взаимодействие материалов стенки с термоядерной плазмой является одной из главных проблем на пути к созданию термоядерного реактора. В ИЯФ СО РАН долгое время исследовался тепловой аспект взаимодействия, как самый разрушительный, накоплен богатый опыт in-situ диагностик и взаимодействия экспериментального изучения с теоретическим описанием. У исследовательской команды имеется опыт исследования на синхротроне и доступ к станции на строящемся синхротроне СКИФ.

Теперь к нашей команде присоединился Евгений Кузьмин с геликонным источником плазмы[1], что позволит в перспективе изучать накопление водорода и его влияние на стойкость к импульсным тепловым нагрузкам. В свою очередь богатый опыт контролируемого нагрева может пригодиться для изучения влияния нагрева на насыщение, что может оказаться важным фактором для динамики растворённого водорода.

На установке проведены предварительные испытания по облучению вольфрама холодной водородной и дейтериевой плазмой с вытягивающим потенциалом подаваемом на мишень порядка 200 В. На текущем этапе работы источника возможны режимы с длительностью 15–30 секунд (низкая мощность 5–15 кВт) и 5–10 секунд (высокая мощность 15–25 кВт), что позволяет проводить материаловедческие исследования с флюенсом ионного потока до 1026 $м^{-2}$. Ближайшие планы включают в себя модернизацию источника и камеры с переходом на полностью стационарный режим работы с ионным потоком до 10^{23} $м^{-2}с^{-1}$. Для исследования накопления изотопов водорода в образце планируется реализация диагностики ЛИДС: с помощью масс спектрометра измерение высвобождаемого из образца газа в режиме десорбции при воздействии коротких лазерных импульсов ниже порога плавления (итербиевый лазер 2 кВт, $P = 10^9$ $Вт/м^2$, $t \sim 1$ мс).

Литература

1. E. I. Kuzmin, et al. Plasma Phys. Rep. 526-535 (2021) 47(6).

УДАЛЕНИЕ ДЕЙТЕРИЯ ИЗ СТАЛИ ЭК-181

Т. А. Шишкова[1,2*], *А. В. Голубева*[1], *Н. О. Степанов*[1], *Д. И. Черкез*[1], *Д. А. Козлов*[1], *Н. П. Бобырь*[1], *М. Б. Розенкевич*[2], *В. М. Чернов*[3]

**anfimova_t_a@mail.ru*

[1] Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва
[2] Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, Москва
[3] Высокотехнологический научно-исследовательский институт неорганических материалов им. А .А. Бочвара, Москва

При эксплуатации термоядерных реакторов необходимо минимизировать накопление трития в материалах вакуумной камеры. На максимально допустимое количество трития в вакуумной камере термоядерного реактора установлены ограничения – не более 700 г для проекта ИТЭР [1]. В связи с этим высокую актуальность приобретают исследования накопления водорода в перспективных материалах термоядерной энергетики, а также исследования эффективности различных методов удаления трития из этих материалов. Для детритизации вакуумной камеры рассматривают методы, основанные на термодесорбции и изотопном замещении трития в материалах.

В настоящей работе представлены результаты сравнения эффективности извлечения дейтерия из стали ЭК-181 методами изотопного обмена и прогрева в вакууме. Сталь ЭК-181 относится к классу низкоактивируемых ферритно-мартенситных сталей, которые рассматривают в качестве конструкционных материалов первой стенки будущих термоядерных установок [2].

Образцы стали ЭК-181 насыщали дейтерием путем выдержки в газообразном D_2 при давлении 5 атмосфер и температуре 473К в течение 25 ч. Для удаления дейтерия образцы прогревали в вакууме и в газообразном водороде при нескольких температурах в диапазоне 373–623 К. Содержание дейтерия в образцах определялось с помощью термодесорбционной спектроскопии.

Результаты, полученные в работе для системы $H-D$, могут быть использованы для оценки эффективности прогрева в вакууме и изотопного обмена в целях детритизации материалов термоядерных установок.

Исследование выполнено в рамках научной программы Национального центра физики и математики, направление № 8 «Физика изотопов водорода».

Литература

1. G. De Temmerman, et al. Nucl. Mater. Energy. 267-272 (2017) 12.
2. G. Mazzone, et al. Fusion Eng. Des. 655-658 (2017) 124.

КИНЕТИКА ИЗОТОПНОГО ОБМЕНА ВОДОРОДА НА МОНО- И БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦАХ МЕДИ, СЕРЕБРА И ЗОЛОТА В ШИРОКОМ ДИАПАЗОНЕ ТЕМПЕРАТУР

М. Б. Пшеницын, С. А. Ефимов, О. А. Боева*
**Pshenmichail@gmail.com*

Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, Москва

Изучение взаимодействия наноагрегатов металлов с самыми разными соединениями – актуальное направление исследований. Уже сегодня, благодаря своим уникальным свойствам, наноматериалы получают всё большее распространение в науке и промышленности. Среди таких материалов выделяются металлические наночастицы, представляющие большой интерес для катализа. Вследствие увеличения доли поверхностных атомов, они обладают высокой поверхностной энергией, а также специфическими свойствами, нехарактерными для массивных металлов, что обусловлено квантово-размерными эффектами, изменяющими электронные и магнитные характеристики атомов. Фундаментальные законы влияния размеров и структуры наночастиц на их конечные свойства ещё до конца не изучены, многое остаётся не ясным, поэтому важно расширять экспериментальную базу, на основе которой будет строиться теория, открывающая путь для практической реализации новых наноматериалов и нанопроцессов.

В данной работе представлены результаты исследований скорости протекания дейтеро-водородного обмена водорода на моно- и биметаллических наночастицах меди, серебра и золота в широком диапазоне температур (от – 196 °C до 200 °C). Изучены каталитические свойства систем на основе Cu, Ag, Au, Cu_mAg_n, Cu_mAu_n, Ag_mAu_n (смешанного состава), Cu@Ag, Cu@Au, Ag@Cu, Ag@Au, Au@Cu, Au@Ag (структуры “ядро-оболочка”).

Исследованные образцы катализируют реакцию дейтеро-водородного обмена. В зависимости от состава скорость протекания обмена может отличаться до 20 раз. На биметаллических системах наблюдался синергетический эффект в каталитических свойствах, так их активность более чем на порядок выше по сравнению с активностью составляющих их монометаллов. В зависимости от температуры проведения реакции молекулы дейтеро-водородной смеси взаимодействовали на активных центрах наночастиц по разным механизмам.

Работа выполнена в рамках программы развития РХТУ им. Д. И. Менделеева «Приоритет-2030».

ОКСИДЫ ВАНАДИЯ ДЛЯ ДЕТЕКТИРОВАНИЯ ВОДОРОДА: ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ ОСАЖДЕНИЯ И ТЕРМИЧЕСКОГО ОТЖИГА НА СТРУКТУРНО-ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

И. Н. Асхадуллин, Е. М. Сгибнев, М. Е. Докукин, А. В. Шелаев, А. В. Барышев*
**ildar1112f@yandex.ru*

Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова, Москва

Ванадий обладает степенями окисления от +2 до +5, оксиды которого обладают особыми электрическими, оптическими и магнитными характеристиками [1]. Благодаря этим свойствам оксиды ванадия представляют интерес для создания газовых сенсоров, элементов оптической памяти, «умных» стекол и фотонных устройств [2]. Среди методов синтеза таких оксидов термическое окисление металлических пленок отличается простотой и доступностью. Однако взаимосвязь между условиями осаждения пленок, параметрами отжига и их конечными структурно-оптическими свойствами требует дополнительного изучения.

В исследовании использовались тонкие пленки, синтезированные методом электронно-лучевого испарения металлического ванадия. Анализировались образцы, полученные при скоростях осаждения 1 нм/с и 0,01 нм/с. Показано, что при фиксированном остаточном давлении в камере (2×10^{-5} торр) изменение скорости напыления влияет на концентрацию кислорода в пленках. Несмотря на близкую толщину (70–75 нм), образцы демонстрируют значительные различия в оптических свойствах. Для окисления до VO_2 и V_2O_5 пленки подвергали термической обработке при 500 °C в течение 2 часов в атмосфере азота с добавлением кислорода. Для пленок, осажденных при 1 нм/с, применяли 20 % (образец I) и 0,2% (образец II) кислорода, а для пленок со скоростью 0,01 нм/с – 20 % (III) и 0 % (IV). Структурные и оптические характеристики исследовали с помощью спектральной эллипсометрии, атомно-силовой микроскопии (АСМ) и спектроскопии комбинационного рассеяния (КР).

Экспериментально подтверждено, что термическая обработка пленок в азотной среде с 20 % содержанием кислорода независимо от скорости их осаждения приводит к образованию фазы V_2O_5. Формирование фазы VO_2 наблюдается только при окислении пленок, нанесенных со скоростью 1 нм/с, в атмосфере с низкой концентрацией кислорода (0,2%). В случае медленного осаждения (0,01 нм/с) остаточный кислород в вакуумной камере способствует образованию аморфного оксида ванадия, который при последующем отжиге в чистом азоте кристаллизуется в фазу VO2.

Термическая обработка вызывает значительное увеличение толщины образцов I и II (в 1,5–2,4 раза), тогда для образцов III и IV прирост составляет лишь 10–15%. Газохромные характеристики пленок V_2O_5 изучены методом спектрофотометрии в кварцевой газовой ячейке после предварительного нанесения каталитического слоя Pd толщиной 3 нм.

Экспериментально показано, что пленки VO_2 проявляют выраженные изменения оптических характеристик в ходе фазового перехода. Так, на длине волны 2500 нм образец II демонстрирует снижение интенсивности пропускания на 54 %, а образец IV – на 60 %. При этом удельная эффективность изменения пропускания (отношение процента изменения к толщине пленки) для образцов II и IV составляет 0,47 %/нм и 0,77 %/нм соответственно. Это свидетельствует о том, что пленки, осажденные с меньшей скоростью (0,01 нм/с), обеспечивают более выраженные оптические изменения при меньшей толщине. Данное свойство

делает VO_2 перспективным материалом для «умных» стекол, болометров и фотонных систем, где критичны динамические изменения прозрачности, также приведены аналитические выкладки для использования пленок диоксида ванадия в качестве детектора водорода.

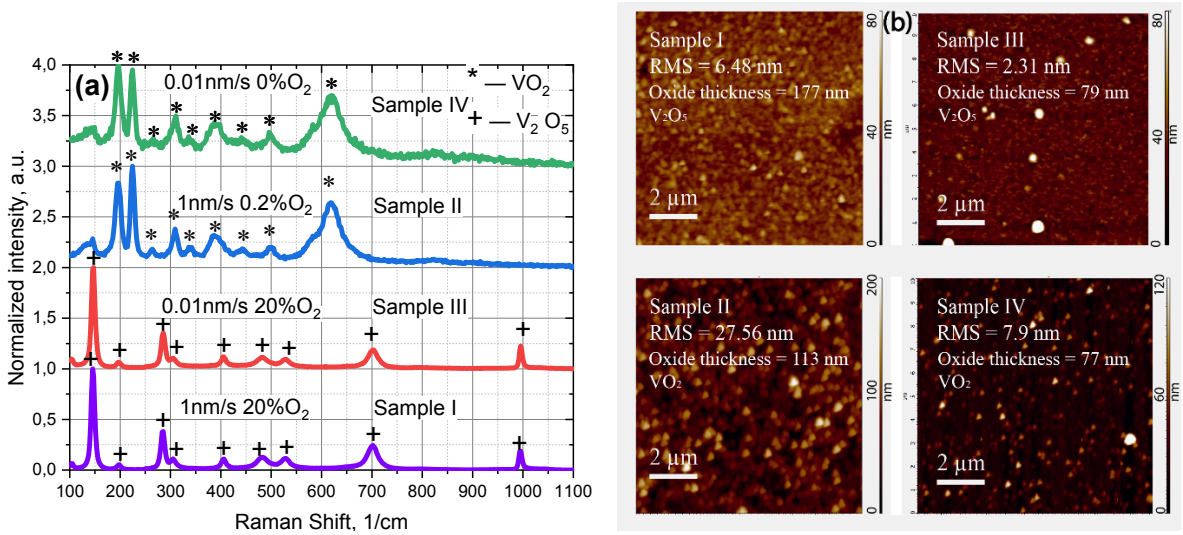


Рис. 1. Спектры КР (a) и АСМ поверхности (b) образцов I–IV

Исследование пленок V_2O_5 с катализаторным слоем Pd выявило их необратимую реакцию на водород в азотной среде при комнатной температуре. При воздействии 0,5 % H_2 зафиксировано изменение оптического пропускания на 11 % на длине волны 1050 нм, что подтверждает потенциал таких структур для создания индикаторных газовых сенсоров.

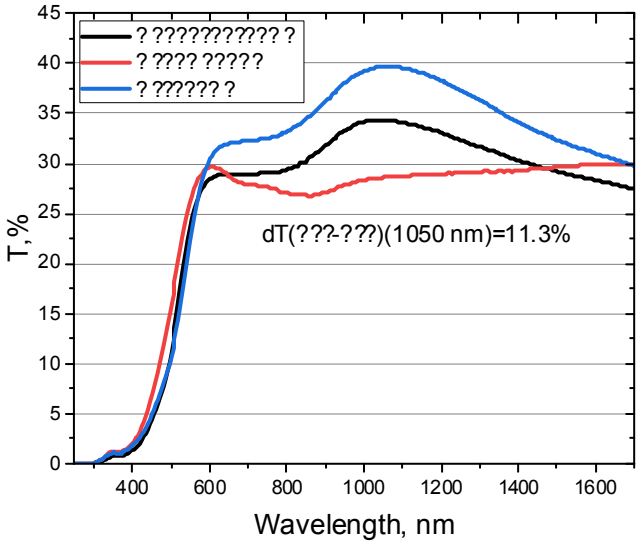


Рис. 2. Изменение спектра пропускания пленки V_2O_5 при взаимодействии с 0,5 % H_2 в азоте

Ключевым результатом работы стало установление влияния скорости осаждения на морфологию пленок. Снижение скорости напыления с последующим окислением позволило уменьшить шероховатость поверхности с 28 до 8 нм и сократить изменение толщины

при термообработке со 150 % до 10 %, одновременно улучшив функциональные параметры. Эти данные подчеркивают, что регулирование скорости осаждения является эффективным инструментом управления структурой и свойствами пленок, что открывает возможности для их интеграции в оптико-электронные устройства с заданными характеристиками.

Литература

1. Hu P. et al. // Chemical Reviews. 2023. Т. 123, N 8. С. 4353–4415.
2. Prasadam V. P. et al. // Materials Today Chemistry. 2019. Т. 12. С. 396–423.

КАТАЛИТИЧЕСКИЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ БОРСОДЕРЖАЩИХ ГИДРИДОВ В ВОДНОЙ ФАЗЕ НА ПОВЕРХНОСТИ МАГНИТООТДЕЛЯЕМЫХ Co-СОДЕРЖАЩИХ КАТАЛИЗАТОРОВ

Н. А. Данилова[1*], *А. М. Озеровв*[2], *О. В. Комова*[2], *В. И. Симагина*[2],*И. Л. Липатникова*[2], *В. Р. Бутенко*[2], *К. А. Дмитрук*[1,2], *О. В. Нецкина*[1,2]

**n.danilova1@g.nsu.ru*

[1]Новосибирский государственный университет, Новосибирск
[2]Институт катализа им. Г. К. Борескова Сибирского отделения РАН, Новосибирск

Компактные генераторы H_2 необходимы для функционирования портативных энергоустановок, проведения химических реакций, создания систем наддува и др. Процесс каталитического гидролиза борсодержащих гидридов ($NaBH_4$ (БГН), NH_3BH_3 (АБ), $(CH_2NH_2BH_3)_2$ (ЭДББ)) позволяет получать H_2 по требованию потребителя без подвода дополнительной энергии. При этом катализатор должен содержать различные центры, активирующие и гидрид, и воду. DFT расчеты показывают [1], что диссоциация H_2O характеризуется более высокой энергией активации. Эта стадия легко протекает на полярной поверхности оксидов. Для диссоциации B-H связи адсорбированного гидрида оптимальна поверхность металлов или их боридов (Co_xB). Показано, что активация Co_3O_4 в реакционной среде позволяет сформировать высокоактивную каталитическую поверхность. Благодаря частичному восстановлению Co_3O_4 гидридом образуются нанодисперсные аморфные частицы Co_xB (x зависит от природы гидрида) и аниондефицитный $Co_3O_{4-\delta}$. Время активационного периода, наблюдаемая скорость реакции и стабильность катализатора зависят от природы гидрида и характеристик Co_3O_4 [1, 2].

В данной работе проведено сравнение кинетики выделения H_2 при каталитическом гидролизе БГН, АБ и ЭДББ в присутствии катализаторов на основе Co_3O_4: Co_3O_4 (100 %), CuO-Co_3O_4 (90 %), а также Co^0-Co_3O_4 (~5, 30 %). Были сопоставлены отношения констант скорости реакции (k_H/k_D) и продолжительности индукционного периода (t_H/t_D) при замене H_2O на D_2O. Установлено, что по мере увеличения содержания Co_3O_4 в составе катализатора наблюдается уменьшение значений k_H/k_D. Таким образом, активность катализаторов с высоким содержанием Co_3O_4 менее зависима от стадии активации H_2O, что согласуется с выполненными расчетами DFT. С другой стороны, использование раствора гидрида в D_2O приводит к заметному увеличению времени активации катализатора, что демонстрирует важную роль воды в процессе восстановления оксида с формированием каталитически активных центров. Кроме того, анализ кинетики каталитического гидролиза АБ и ЭДББ в рамках модели Ленгмюра-Хиншельвуда для CuO-Co_3O_4 катализатора позволил высказать предположение, что адсорбция гидрида также играет важную роль и определяет скорость выделения H_2.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ИК СО РАН (проект FWUR-2024-0034). Авторы благодарят Булавченко О. А., Ищенко А. В., Рогова В. А. за проведенное исследование образцов катализаторов.

Литература

1. Butenko V. R. et al. Materials 17(8) (2024) 1794.
2. Komova O. V. et al. Int. J. Hydrogen Energy 111 (2025) 361.

ВЛИЯНИЕ НАСЫЩЕНИЯ ПОВЕРХНОСТИ МЕТАЛЛОВ ВОДОРОДОМ НА КАТАЛИТИЧЕСКОЕ ГИДРИРОВАНИЕ CO_2

К. А. Дмитрук[1,2*], *И. А. Подоляко*[1,2], *О. В. Комова*[2], *С. А. Муха*[2], *О. В. Нецкина*[2]
**k.dmitruk@g.nsu.ru*

[1]Новосибирский Государственный Университет, Новосибирск
[2]Институт Катализа им. Г. К. Борескова Сибирского отделения РАН, Новосибирск

В последние десятилетия активно развивается водородная энергетика, целью которой является решение экологических проблем, связанных с сжиганием ископаемых топлив и выбросом углекислого газа в атмосферу. По мнению экспертов, увеличение концентрации CO_2 привело к ускорению темпов глобального потепления, поэтому его утилизация является актуальной задачей. В качестве одного из методов снижения концентрации CO_2 в атмосфере выступает реакция гидрирования CO_2 до метана, известная как метанирование. Этот процесс также можно рассматривать как процесс аккумулирования водорода в химически связанном состоянии [1]. Он осуществляется наиболее эффективно на металлах платиновой группы, однако переходные металлы, такие как никель, демонстрируют приемлемую каталитическую активность [2]. При этом в ходе реакции активный компонент насыщается водородом, но его влияние на скорость протекания каталитических процессов до сих пор является неизученным.

Целью данной работы являлось установление взаимосвязи между каталитической активностью различных переходных металлов (Co, Ni, Cu, Rh, Pd, Pt) в реакции метанирования CO_2 и насыщением их поверхности водородом.

В ходе данного исследования методом пропитки был синтезирован ряд катализаторов, нанесённых на γ-Al_2O_3, и испытан в реакции метанирования CO_2 для сравнения их каталитической активности. С использованием методов DFT, реализованных в ПО VASP, было установлено влияние сорбированного водорода на распределение электронной плотности, а также на адсорбцию и активацию участников реакции. Помимо этого, была рассчитана энергия связи M-H в зависимости от степени насыщенности поверхности, в том числе с учётом влияния подповерхностного слоя водорода в тетраэдрических полостях.

Таким образом, был установлен вклад насыщения поверхности металлов водородом в их каталитическую активность метанирования CO_2.

Литература

1. Sterner M., Specht M. Power-to-Gas and Power-to-X—The History and Results of Developing a New Storage Concept: 20 // Energies. Multidisciplinary Digital Publishing Institute, 2021. Т. 14, № 20. С. 6594.

2. Fan W. K., Tahir M. Recent trends in developments of active metals and heterogenous materials for catalytic CO2 hydrogenation to renewable methane: A review // J. Environ. Chem. Eng. 2021. Т. 9, № 4. С. 105460.

МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГИДРИДОВ ВЫСОКО- И СРЕДНЕЭНТРОПИЙНЫХ СПЛАВОВ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ С НИКЕЛЕМ

А. А. Курганская[1,2*], *Чж. Лю*[1], *И. С. Терёшина*[1], *С. В. Митрохин*[1]
**kurganskaia.aa17@physics.msu.ru*

[1]Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва
[2]Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана, Москва

Разработка магнитного охлаждения в области криогенных температур может обеспечить значительный прорыв в технологиях охлаждения благодаря повышенной энергоэффективности и экологической устойчивости по сравнению с традиционными методами. Ключевая задача в этой области — поиск магнитокалорических материалов, эффективно работающих в температурном диапазоне ниже 20 К.[1,2]. Последние достижения в области материаловедения представили получение средне- и высокоэнтропийных сплавов как новый подход к улучшению функциональных свойств за счёт наличия 4 и более компонент в одном сплаве. Гидриды на основе соединений RNi выделяются как особенно перспективные благодаря хорошим магнитокалорическим свойствам и настраиваемой (путём варьирования состава) температуре магнитного упорядочения [3]. В данной работе исследуются магнитотепловые характеристики гидридов среднеэнтропийного $Gd_{0.33}Tb_{0.33}Dy_{0.33}Ni$ и высокоэнтропийного $Gd_{0.25}Tb_{0.25}Dy_{0.25}Y_{0.25}Ni$ сплавов. Гидриды $Gd_{0.33}Tb_{0.33}Dy_{0.33}NiH_{4.0}$ и $Gd_{0.25}Tb_{0.25}Dy_{0.25}Y_{0.25}NiH_{3.0}$ были синтезированы на установке типа Сивертса с рабочим диапазоном давления водорода до 10 МПа. Состав гидридов рассчитывался волюметрическим методом, с помощью уравнения Ван-дер-Ваальса. Рентгеноструктурный анализ образцов (РСА) производился в геометрии Брэгга-Брентано с использованием излучения Cu-Ka в диапазоне 2θ = 10–120° с шагом 0,0072°. Изотермы намагниченности образцов были получены в магнитных полях до 7 Тл в диапазоне температур 2 – 270 К. Магнитокалорический эффект (МКЭ) определялся косвенным методом с использованием соотношения Максвелла. Было определено, что оба гидрида кристаллизуются в орторомбической структуре CrB (пространственная группа 62, Cmcm). Температуры Кюри обоих образцов определялись двумя методами: с помощью анализа кривых Белова-Аррота, а также с помощью анализа зависимости производной намагниченности от температуры. Было определено, что температуры Кюри обоих исследованных образцов составляют 3 К. Внешнее магнитное поле ($\mu_0 H$ = 1 Тл) увеличивает температуру Кюри: до 7 К у $Gd_{0.33}Tb_{0.33}Dy_{0.33}NiH_{4.0}$ и до 5 К у $Gd_{0.25}Tb_{0.25}Dy_{0.25}Y_{0.25}NiH_{3.0}$. Также было определено, что добавление иттрия в редкоземельную подрешётку приводит к тому, что зависимость МКЭ от приложенного внешнего магнитного поля выходит на насыщение (рис. 1). В результате при $\mu_0 \Delta H$ = 5 Тл - ΔS_m = 15,7 Дж/(кг$^{-1}$К$^{-1}$) и -ΔS_m = 12,2 Дж/(кг$^{-1}$К$^{-1}$) для $Gd_{0.33}Tb_{0.33}Dy_{0.33}NiH_{4.0}$ и $Gd_{0.25}Tb_{0.25}Dy_{0.25}Y_{0.25}NiH_{3.0}$ соответственно. Эти свойства позволяют рассматривать оба исследованных материала как перспективные для применения в магнитном охлаждении в области криогенных температур.

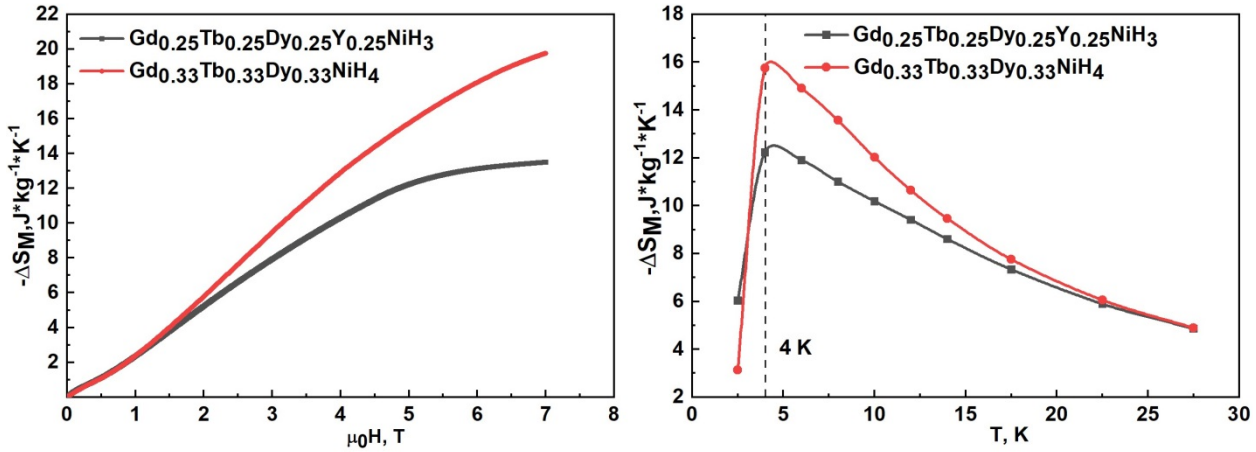


Рис. 1. Зависимости МКЭ от внешнего магнитного поля и от температуры для $Gd_{0.33}Tb_{0.33}Dy_{0.33}NiH_{4.0}$ и $Gd_{0.25}Tb_{0.25}Dy_{0.25}Y_{0.25}NiH_{3.0}$.

Исследование выполнено в рамках государственного задания МГУ им. М. В. Ломоносова.

Часть исследования была выполнена в рамках государственного задания МГУ им. М. В. Ломоносова, проект 122012400186-9.

Литература

1. P. Kumari, A. K. Gupta, R. K. Mishra, M.S. Ahmad, R. R. Shahi // JMMM, 2022. 554.

2. F. Marques, M. Balcerzak, F. Winkelmann, G. Zepon, M. Felderhoff // Energy Environ. Sci. 2021. 14.

3. A.A. Kurganskaya, Zh. Liu, E.S. Kozlyakova, T.P. Kaminskaya, I.S. Tereshina, V.N. Verbetsky, S.V. Mitrokhin, A.N. Vasiliev // JMMM. 2025. 627.

РАЗДЕЛЕНИЕ ОБМЕННОГО И НЕОБМЕННОГО ТРИТИЯ ДЛЯ ЦЕЛЕЙ РАДИАЦИОННОГО МОНИТОРИНГА И РАДИОБИОЛОГИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ

В. К. Величко
velichkovaleri@mail.ru

Федеральный медицинский биофизический центр им. А. И. Бурназяна, Москва

Аннотация: проведены исследования по разделению обменного и необменного трития для модельных водных смесей (дисперсионная система и раствор) методом вакуумного высушивания. Результаты проведенных исследований показали полное разделение обменного и необменного трития в пробе смеси вне зависимости от их характеристик.

Актуальность

Тритий – радиоактивный изотоп водорода, подлежащий обязательному государственному контролю [1]. В литературе приведены данные [2], свидетельствующие о различии в получаемой дозе внутреннего облучения от трития, находящегося в различном для изотопного обмена положении. В связи с этим появляется необходимость в методах разделять обменный и необменный тритий для уточнения вклада каждой отдельной фракции при радиационном мониторинге или радиобиологических исследований.

Материалы и методы

Для исследований были приготовлены модельные смеси, содержащие обменный тритий (оксид трития (НТО) и необменный тритий ([метил-^{3}H]Тимидин). В таблице 1 представлены характеристики используемых в эксперименте смесей.

Таблица 1

Характеристики модельных смесей

Смесь №	Состав	Активность смеси, Бк/мл	Комментарий
1	Микрокристаллическая целлюлоза и НТО*	110	Радиевый институт, 1 МБк/г
2	([метил-3H] Тимидин и дистиллированная вода	123	Институт молекулярной генетики РАН, 40 МБк/мл

*Дисперсионная смесь НТО и микроцеллюлозы на протяжении всего эксперимента находилась на перемешивающем устройстве во избежание осаждения.

Из каждой смести отбиралось по 5 мл и раскапывались по 1 мл в ампулы для лиофилизации. Образцы в ампулах замораживались 30 минут при температуре 100 °С и после замерзания подсоединялись к лиофильной сушилке Labconco Free Zone. После полного удаления растворителя из ампул, оценивалось содержание трития в ампулах и в конденсате со змеевика морозильной камеры лиофильной сушки. Содержание трития подсчитывалось ме-

тодом жидкосцинтилляционной спектрометрии при помощи низкофонового радиометра TriCarb 3180 TR/SL.

В каждом случае определялись суммарно измеренная активность после разделения форм трития и потери активности, различия между выборками до данным показателям анализировались с помощью *t* –критерия Стьюдента ($p < 0{,}95$).

Результаты и обсуждения

Результаты разделения обменного и необменного трития для каждой из смесей приведены в таблице 2.

Таблица 2

Результаты проведенных исследований.

	Микрокристаллическая целлюлоза и НТО					3Н – тимидин + дистиллированная вода				
Активность в каждой ампуле до сушки, Бк	110					123				
Активность в извлеченной влаге, Бк	97 (88 %)	89 (81 %)	88 (80 %)	97 (88 %)	89 (81 %)	0				
Активность в ампуле**, Бк	0					97 (79 %)	100 (81 %)	98 (80 %)	96 (78 %)	100 (81 %)
Суммарная измеренная активность, Бк	97 (88 %)	89 (81 %)	88 (80 %)	97 (88 %)	89 (81 %)	97 (79 %)	100 (81 %)	98 (80 %)	96 (78 %)	100 (81 %)
Среднее	**92±5 (84%±4%)**					**98±2 (80%±1%)**				
Потери, Бк	13 (12 %)	21 (19 %)	22 (20 %)	13 (12 %)	21 (19 %)	26 (21 %)	23 (19 %)	25 (20 %)	27 (22 %)	23 (19 %)
Среднее	18±5 (16 % ± 5 %)					25 ± 2 (20 % ± 1 %)				

** Перерасчёт на каждую ампулу, путём деления общей активности полученной из конденсата со змевика морозильной камеры на пять

Эффективность разделения обменного и необменного трития в смесях оценивалась по суммарно измеренной активности, подсчитанному после разделения. Для обеих смесей среднее значение суммарно измеренной активности составляет не менее 80 % от исходного значения. Выявлено, что потери активности составляют в среднем 20 % и не зависит от формы трития в исследуемой смеси, что говорит об универсальности метода вакуумной сушки для разделения обменного и необменного трития.

Выводы

На примере модельных смесей было осуществлено разделение обменного и необменного трития методом вакуумного высушивания. Для всех смесей было установлено полное удаление обменного трития из ампул для лиофилизации засчет смещения изотопного равновесия во время сушки. Для обоих смесей методом вакуумного высушивания было обнару-

жено до 80 % от исходной активности. До 20 % от общей активности смесей приходится на потери метода. Погрешности измерений не превышают 5 %.

Метод является перспективным способом для очистки поверхностей конструкционных материалов и меченых соединений от обменного трития и для разделения обменного и необменного трития в разных средах для целей радиационного мониторинга и радиобиологических экспериментов.

Литература

1. Постановление правительства РФ № 1069, 19.10.2012.

2. Беловодский Л. Ф., Гаевой В. К., Гришмановский В. И. Тритий. М.: Энергоатомиздат, 1985.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ ДЕЙТЕРИЯ В БЕНЗОЛЕ МЕТОДОМ ИК ФУРЬЕ-СПЕКТРОМЕТРИИ В ШИРОКОЙ ОБЛАСТИ КОНЦЕНТРАЦИЙ

Д. Д. Викулов, И. Л. Растунова, А. Н. Букин, С. А. Марунич, В. С. Мосеева, И. А. Вораксо, А. Ю. Чеботов*

**vikulov.d.d@muctr.ru*

Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, Москва

Дейтерированные растворители используются в целях определения структуры органических соединений методом ЯМР-спектроскопии, а также в качестве стандартных образцов для масс-спектрометрии.

В данной работе, направленной на разработку методики определения содержания дейтерия в бензоле методом ИК фурье-спектрометрии, установлены аналитически значимые волновые числа и получены калибровочные уравнения, связывающие интенсивности аналитического сигнала с концентрацией дейтерия.

Приготовление калибровочных растворов дейтерированного бензола проводилось путем разбавления C_6D_6 с концентрацией дейтерия 99,5 % ат. в C_6H_6 природного изотопного состава (концентрация дейтерия ~0,015 % ат.).

Запись ИК спектров калибровочных растворов производилась на приборе Thermo Scientific Nicolet iS10.

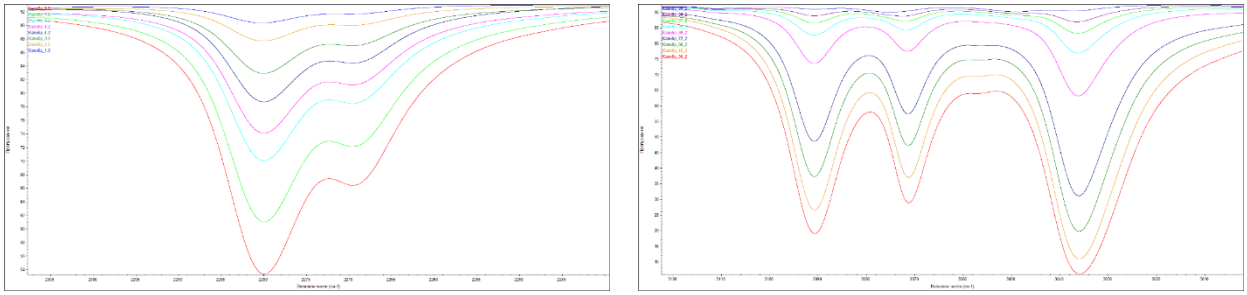
Для анализа выбраны волновые числа 3036 $см^{-1}$ (валентные колебания связей C–H), 2280 и 2270 $см^{-1}$ (валентные колебания связей C–D). В ходе статистической обработки результатов измерений получены калибровочные зависимости для флюоритовой кюветы с толщиной поглощающего слоя 0,015 мм. Уравнения представлены в таблице 1.

Таблица 1

Калибровочные зависимости

Уравнение	Область концентраций дейтерия	δ, % отн.
$[D] = -(49{,}9 \pm 2{,}0)A_{3036} + (88{,}8 \pm 3{,}3)$	$[D] = 1 \div 15$ % ат.	-4,0
$[D] = -(58{,}39 \pm 0{,}24)A_{3036} + (101{,}48 \pm 0{,}27)$	$[D] = 15 \div 70$ % ат.	-2,9
$[D] = (84{,}15 \pm 0{,}34)A_{2280} - (3{,}79 \pm 0{,}32)$	$[D] = 45 \div 95$ % ат.	2,9
$[D] = (131{,}96 \pm 0{,}61)A_{2270} - (3{,}51 \pm 0{,}36)$		3,3
$[D] = (76{,}4 \pm 1{,}9)A_{2280} + (5{,}5 \pm 2{,}4)$	$[D] = 95 \div 99{,}5$ % ат.	1,3
$[D] = (127{,}180 \pm 0{,}049)A_{2270}$		1,7

Уменьшение пропускания в областях волновых чисел 2270, 2280 и 3036 $см^{-1}$ с увеличением концентрации дейтерия или протия в бензоле показано на рисунке 1.



а *б*

Рис. 1. Уменьшение пропускания в областях валентных колебаний: *а* – C–D при увеличении [D] от 1 до 20 % ат.; *б* – C–H при уменьшении [D] от 99 до 30 % ат.

Полученные калибровочные зависимости позволяют с удовлетворительной точностью (относительной ошибкой < 5 % отн.) определять концентрацию дейтерия в бензоле в диапазоне концентраций $1 \leq [D] \leq 99{,}5$ % ат., что необходимо как при контроле качества готового продукта, так и при решении исследовательских задач.

Работа выполнена в рамках программы развития РХТУ им. Д. И. Менделеева «Приоритет 2030».

ОТРАБОТКА МЕТОДИКИ КОНТРОЛЯ ИЗОТОПНОЙ И ХИМИЧЕСКОЙ ЧИСТОТЫ ДЕЙТЕРИРОВАННОГО ХЛОРОФОРМА

И. А. Воракco, А. Ю. Чеботов, И. Л. Растунова*
**gorn200@yandex.ru*

Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, Москва

Растворители, в которых атомы протия замещены атомами дейтерия, применяются в спектроскопии ядерного магнитного резонанса (ЯМР). На использование именно дейтерированных аналогов есть несколько причин. Интенсивность сигнала, который даёт недейтерированный растворитель в протонном спектре, всегда будет значительно выше, чем интенсивность сигнала растворённого продукта, что уменьшает возможность достоверной и полной интерпретации спектра. Также дейтерированные растворители используются в стабилизационной процедуре «дейтериевый лок», используемой для поддержания постоянной напряженности магнитного поля в течение длительного промежутка времени [1, 2].

Дейтерированные растворители можно получить двумя способами: прямой синтез и изотопный обмен водорода. В обоих случаях необходим строгий аналитический контроль как изотопной, так и химической чистоты полученного соединения.

К методам контроля изотопного состава применяются такие требования как экспрессность, относительная простота использования, точность, воспроизводимость результатов измерения, важным качеством также является возможность использования малых количеств исследуемого вещества, так как это напрямую влияет на выход продукта. Всем перечисленным требованиям отвечает метод инфракрасной спектроскопии с преобразованием Фурье, который был применён в данной работе для определения концентрации дейтерия в хлороформе. Поскольку ИК-Фурье спектроскопия относится к группе методов именно структурного (не элементного) анализа, то к достоинствам выбранного метода следует отнести нечувствительность к протию, содержащемуся в воде, которая является характерной примесью, поступающей в исследуемую пробу на стадиях синтеза, отбора пробы и подготовки к анализу. Эта особенность метода позволяет проводить анализ непосредственно во время синтеза, между его стадиями [3].

Такие же требования применяются и к анализу химической чистоты растворителя. Помимо, собственно, ЯМР-спектроскопии, для которой синтезируется растворитель, всем требованиям соответствует газовая хроматография с масс-спектрометрическим детектированием (ГХ-МС). Благодаря такому типу детектора данный метод позволяет не только определить суммарное содержание примесей, но идентифицировать их, что помогает отследить путь появления примеси в технологии производства растворителя.

В работе показаны пути возникновения типичных для дейтерированного хлороформа примесей. Так, например, природный хлороформ содержит всегда имеет примеси этанола (добавка для стабилизации), дихлорметана и хлорбромметана (образуются при производстве хлороформа).

Предложенная методика получения хлороформа-d методом изотопного обмена с водой позволяет значительно сократить содержание этих примесей в пробе даже без предварительно абсолютизации хлороформа – общее содержание примесей уменьшается в 5 раз

по сравнению с природным $CHCl_3$. Так, например, в полученном продукте не обнаруживается примесь этанола. Однако, следует отметить, что содержание четыреххлористого углерода и хлорбромметана не изменяется в ходе синтеза.

Работа выполнена в рамках программы развития РХТУ им. Д. И. Менделеева «Приоритет 2030».

Литература

1. Дероум Э. Современные методы ЯМР для химических исследований. М.: Мир. 1992.

2. Hoye T, Eklov B, Ryba T., Voloshin M., Yao L. No-D NMR (No-Deuterium Proton NMR) Spectroscopy: A Simple Yet Powerful Method for Analyzing Reaction and Reagent Solutions // Organic Letters. 2004. Vol. 6, No.6. P. 953-956. DOI: 10.1021/ol049979+ .

3. Харькова С.А., Вораксо И.А., Чеботов А.Ю., Растунова И.Л. Анализ изотопной чистоты дейтерохлороформа методом инфракрасной спектроскопии с преобразованием Фурье в широкой области концентраций // Успехи в химии и химической технологии. 2024. Т. XXXVIII, № 10 (289). С. 51–54.

РАЗРАБОТКА СИСТЕМЫ РЕЦИРКУЛЯЦИИ ИЗОТОПОВ ВОДОРОДА, ОСНОВАННОЙ НА ЯВЛЕНИИ СВЕРХПРОНИЦАЕМОСТИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ МЕМБРАН

Д. А. Зайцев, А. О. Буснюк, С. Р. Кузенов, А. И. Лившиц, Е. Ю. Передистов*
**zaitsev.da@sut.ru*

Санкт-Петербургский государственный университет телекоммуникаций им. проф. Бонч-Бруевича, Санкт-Петербург

Целью данной работы является исследование явления сверхпроницаемости металлических мембран (СПМ) по надтепловым водородным частицам и возможности применения СПМ для отделения от He, откачки и рециркуляции D/T в топливном цикле УТС [1,2].

Отделение от He и откачка изотопов водорода (H2 и D2) исследуются в экспериментах с прямонакальной ниобиевой СПМ цилиндрмчесмкой формы диаметром 100мм и длиной 200мм. Внутри цилиндрической мембраны располагается термический атомизатор молекулярного водорода в виде прямонакальных танталовых лент площадью.

За явление сверхпроницаемости и все основные характеристики СПМ отвечает энергетический барьер рекомбинативного выделения абсорбированного водорода, который создаётся монослойными плёнками неметаллических примесей на поверхности СПМ [2]. Задачей данной работы было исследование возможности создания такого барьера с помощью S и соседнего с серой элемента по подгруппе – Se. Оба элемента известны как сильные каталитические яды. S и Se наносились *in situ* пиролизом H_2S и H_2Se входную поверхность мембраны при ее омическом нагреве до 650 ^oC. Было найдено, что и селен, и сера образуют высокий плотный энергетический барьер рекомбинативной реэмиссии абсорбированных в Nb атомов H и D. Благодаря этому удалось получить высокую ($>10^{17}$ $H_2/(см^2с)$) плотность проникающего потока в режиме сверхпроницаемости, а также высокую (≈15) степень асимметрии СПМ.

Литература

1. Karpov D. A., Ivanov A. G., Livshits A. I., Dranichnikov A. N. Vacuum pumping system of TRT // Plasma Physics Reports, 47 (2021) 1267–1284. Doi: 10.31857/S0367292121120027.

2. Передистов Е. Ю., Буснюк А. О., Алимов В. Н., Кузенов С. Р., Лившиц А. И. Демонстрация возможности селективной откачки D/T-смеси в установках управляемого термоядерного синтеза с помощью сверхпроницаемых мембран // Письма в ЖТФ. 2024. Т. 50. Вып. 1344-4.

ВЫДЕЛЕНИЕ ТРИТИЯ ИЗ ПОТОКА ГАЗА НОСИТЕЛЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПАЛЛАДИЙ-СЕРЕБРЯНОЙ МЕМБРАНЫ ПРИМЕНИТЕЛЬНО К СИСТЕМЕ ГАЗООЧИСТКИ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО ЖИДКОСОЛЕВОГО РЕАКТОРА

О. А. Кучеров, А. С. Аникин, А. А. Семенов, В. Р. Тарасов, Р. В. Чекушин, М. И. Беляков, Н. Е. Забирова, А. Н. Букин, Е. В. Козлова*

**OsaKucherov@bochvar.ru*

Высокотехнологический научно-исследовательский институт неорганических материалов им. А. А. Бочвара», Москва

Развитие концепции жидко-солевого реактора является логичным продолжением реализации двухкомпонентного замкнутого ядерного топливного цикла. В нашей стране ведутся работы по созданию исследовательского жидко-солевого реактора (ИЖСР), основное назначение которого – трансмутация минорных актинидов, образующихся в процессе эксплуатации АЭС. В процессе работы ИЖСР происходит выделение радиоактивных изотопов, в том числе и радиоактивного газообразного трития [1].

Настоящая работа посвящена выделению трития вместе с другими изотопами водорода из смеси газов на основе гелия. Эксперименты, проведенные в рамках данной работы, должны лечь в основу разработки одного из узлов системы газоочистки исследовательского жидкосолевого реактора. Мембранное разделение обладает чрезвычайно высокой селективностью по отношению к изотопам водорода. Наилучшими показателями обладает мембрана из сплава Pd / Ag, достигнутая степень детритизации на которой составляет 10^5 [2].

Методика обработки экспериментальных данных, а также расчёт основных диффузионных характеристик трития в данной работе совпадала с ранее апробированной работой [3]. Для проведения испытаний был разработан образец палладий-серебряного сплава с содержанием серебра 15 мас. %, по которым был изготовлен аппарат для диффузионных испытаний. Для проверки работоспособности методики из никеля НП2 был изготовлен образец сравнения. По экспериментальным данным были определены поток водорода через образец после стабилизации, $\Phi_{\text{Н}}$ (см^3/с), эффективные коэффициенты диффузии, $D_{\text{эф}}$ (см^2/с), и проницаемости, $P_{\text{эф}}$ (см^3/(с·см·Па^{0,5})), а также эффективная растворимость протия, $S_{\text{эф}}$ (см^3/(см^3·Па^{0,5})). Полученные результаты были пересчитаны для диффузанта (трития) путем деления на $K_{\text{Т/Н}}$.

В ходе исследования были получены следующие результаты:

1. Установлены температурные зависимости эффективных коэффициентов диффузии, проницаемости и растворимости трития для палладий-серебряной мембраны с концентрацией серебра 15 %.

2. Определена скорость выделения изотопов водорода из смеси с гелием при использовании циркуляционного режима работы газовой смеси с входной стороны.

Литература

1. Адамов Е. О. и др. Белая книга ядерной энергетики. 2001.

2. Bornschein B. et al. Tritium tests with a technical PERMCAT for final clean-up of ITER exhaust gases //Fusion engineering and design. 2003. Т. 69, №. 1–4. С. 51–56.

3. Аникин А. С. и др. Определение диффузионных характеристик трития в конструкционном материале жидкосолевого реактора //Атомная энергия. 2022. Т. 133, №. 5–6. С. 265–271.

НАНОСТРУКТУРЫ НА ОСНОВЕ ОКСИДОВ НИОБИЯ: ИЗГОТОВЛЕНИЕ С ПОМОЩЬЮ ВОЗДЕЙСТВИЯ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ДЛЯ ДЕТЕКТИРОВАНИЯ ВОДОРОДА

А. А. Лычагина[1,2*], *И. Н. Асхадуллин*[1], *А. В. Шелаев*[1], *Д. П. Куликова*[1], *Е. М. Сгибнев*[1], *М. С. Сидельников*[3], *А. Г. Шишкин*[1,2], *В. С. Столяров*[1,2], *А. В. Барышев*[1]

**lychagina.aa@phystech.edu*

[1] Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова, Москва

[2]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Долгопрудный

[3]Институт физики твердого тела Российской академии наук, Черноголовка

Оксид ниобия (V) обладает газохромизмом – способностью изменять свои оптические свойства в результате восстановительной реакции при взаимодействии с водородом ($Nb_2O_5 \rightarrow Nb_2O_{5-x}$). Благодаря этому свойству Nb_2O_5 является перспективным материалом для создания высокочувствительных оптических и электрических датчиков для детектирования водорода [1,2]. Известно, что увеличение эффективной площади взаимодействия газохромного материала с водородом позволяет значительно улучшить характеристики газовых датчиков. В отличие от термического окисления ниобия или Nb_2O_5, осаждённого с помощью вакуумных технологий, при которых формируется планарная оксидная плёнка, лазерное окисление позволяет создавать сложную развитую поверхность оксида, многократно увеличивая площадь взаимодействия Nb_2O_5 с газовой средой.

В работе исследовались тонкие плёнки ниобия (100 нм), изготовленные методом магнетронного распыления. Для лазерного окисления использовался фемтосекундный лазер с длиной волны 525 нм и частотой следования импульсов 80 МГц. Для формирования наноструктур лазерное излучение фокусировалось с помощью объектива (×20, NA = 0,4) в пятно диаметром 5 мкм. С помощью линейного транслятора обеспечивалось равномерное движение лазерного пучка по образцу. Структурные и оптические свойства изготовленных образцов исследовалась методами атомно-силовой микроскопии, растровой электронного микроскопии, оптической спектроскопии, спектроскопии комбинационного рассеяния (КР) и спектральной эллипсометрии.

Эксперименты показали, что с ростом энергии импульса от 1,2 до 12,8 нДж высота модифицированной лазером области (ВМЛО) над поверхностью пленки увеличивалась с 1 до 1000 нм при скорости движения лазерного пучка 200 мкм/с. В диапазоне энергии импульса от 1,2 до 2,5 нДж ВМЛО линейно росла от 1 до 8 нм. При достижении значения энергии 2,5 нДж наблюдалось резкое возрастание ВМЛО до 200 нм. Дальнейшее увеличение энергии импульса излучения до 12,7 нДж или уменьшение скорости движения лазерного пучка приводило к формированию канавок в плёнке ниобия на всю её толщину. В ходе исследования определены оптимальные параметры лазерного воздействия, при которых не наблюдалось разрушение подложки, а ВМЛО составляет более 100 нм. Кроме того,

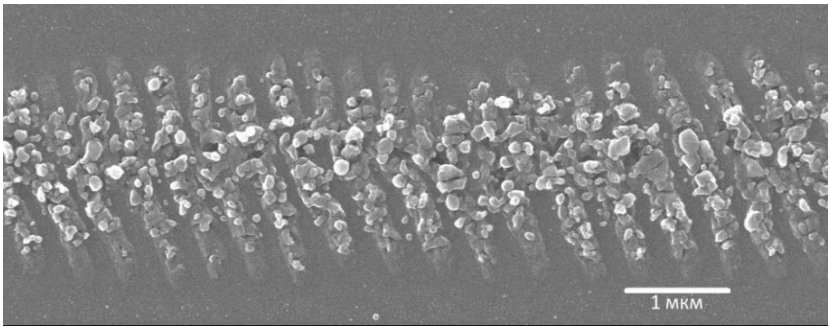


Рис. 1. РЭМ-изображение области лазерного воздействия при скорости транслятора 50 мкм/с и энергии импульса 2 нДж. Высота профиля оксидного слоя в центральной части составила 115 нм

на поверхности металлической плёнки ниобия было обнаружено формирование периодических наноструктур с периодом 410 нм (рис. 1), а в спектрах КР были обнаружены пики соответствующие Nb_2O_5. Таким образом, данный режим позволяет создавать развитую поверхность оксида ниобия, необходимую для изготовления чувствительных элементов. В рамках доклада будет обсуждаться отклик изготовленных наноструктур с катализатором (Pt или Pd) в водородосодержащей атмосфере.

Литература

1. Ab Kadir R. [et al.] Optical gas sensing properties of nanoporous Nb_2O_5 films // ACS Appl. Mater. Interfaces. 2015. V. 7(8). P. 4751–4758.

2. Komurcu H. A. [et al.] Production of hydrogen gas sensors based on sol–gel spin-coated Nb_2O_5 thin films //Journal of Materials Science: Materials in Electronics. 2023. V. 34(10). P. 922.

ФОТО- И ГАЗОХРОМНЫЕ СВОЙСТВА НАНОСТРУКТУРИРОВАННОГО (ПУХА) ОКСИДА ВОЛЬФРАМА

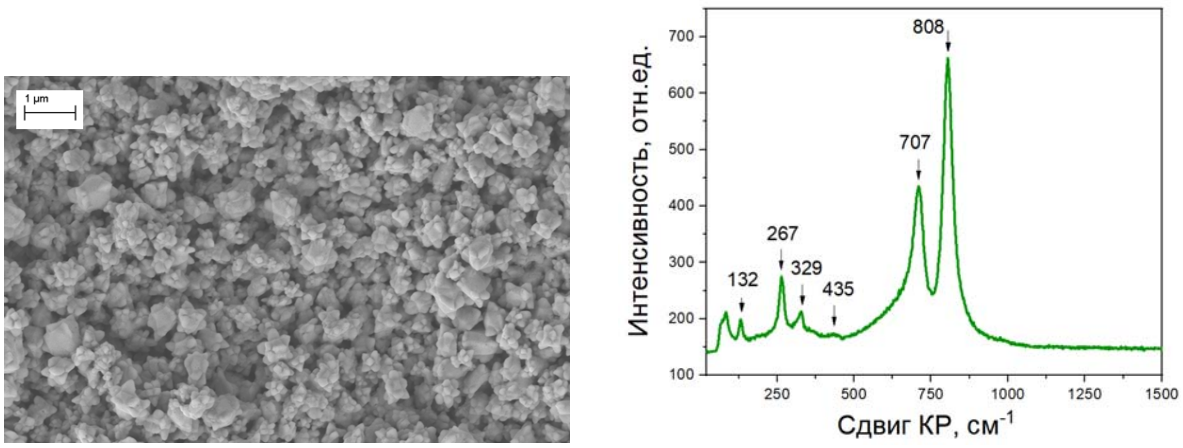
О. А. Лютикова[1], М. Е. Докукин[1], Д. П. Куликова[1], А. В. Барышев[1], А. В. Казиев[2], Г. С. Ломоносов[2], М. М. Харьков[2]*

**lutikovaolga@mail.ru*

[1] Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова, Москва
[2]Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва

Обработка металлов потоком гелиевой плазмы является методом, позволяющим получать наноструктурированную поверхность, называемую «металлическим пухом», для широкого ряда металлов, включая вольфрам, титан, молибден и др. [1]. Показано, что подобные системы с развитой поверхностью могут быть получены с помощью технологии импульсного магнетронного распыления в среде плазмообразующего гелия [2]. Дополнительный термический отжиг микро- и наноструктурированных металлов приводит к их окислению и формированию мезопористых оксидов. Подобные газочувствительные оксиды с развитой поверхностью, в частности, оксид вольфрама [3], являются перспективными в разработке сенсоров водорода ввиду высокого отношения поверхности к объёму материала.

В представленной работе анализировались оптические свойства наноструктурированного триоксида вольфрама (WO_3), полученного технологией импульсного магнетронного распыления в среде гелия. Термическое окисление производилось на воздухе при температуре 500 °C в течение 1 часа. Спектры рассеяния в обратную полусферу были измерены с помощью интегрирующей сферы. Отжиг привел к окислению наноструктурированного вольфрама до триоксида вольфрама с моноклинной кристаллической решёткой [4], отличающегося высокой пористостью (рис. 1).



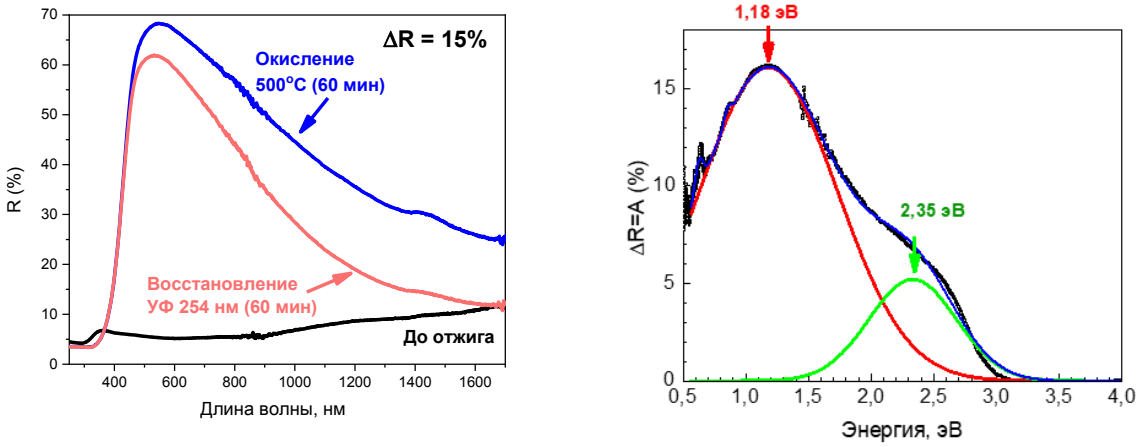
а б

Рис. 1 (а) РЭМ-изображение и (б) спектр комбинационного рассеяния наноструктурированного WO_3

В результате воздействия ультрафиолетового (УФ) излучения с длиной волны 254 нм в течение 30 минут на поверхность наноструктурированного WO_3 обнаружено уменьшение интенсивности рассеяния света от образца из-за роста поглощения материала (рис. 2, *а*),

т. е. наблюдается эффект фотохромизма. Показано, что после воздействия УФ излучения при хранении на воздухе в течение 72 часов оксид вольфрама переходит в состояние с меньшим количеством кислородных вакансий, но для полного восстановления оптических свойств образца требуется дополнительный отжиг при температуре 300 °C в течение 30 минут в воздухе. Представленный в работе наноструктурированный WO_3 не изменяет свои оптические свойства при многократном повторении цикла облучения УФ/термического окисления.

На рис. 2, *б* показана спектральная зависимость изменения интенсивности рассеяния света от поверхности наноструктурированного оксида вольфрама, обусловленного влиянием УФ излучения. Наблюдаемые особенности коррелируют с экспериментальными данными, полученными в работе [5], в которой исследовались оптические свойства наноплёнок аморфного WO_3 при протекании реакции восстановления в водороде и, соответственно, образовании кислородных вакансий [5]. В случае наноструктурированного триоксида вольфрама, выделенные на рис. 2, *б* гауссовы кривые можно отнести к полосам поглощения [5], возникающим за счёт образования кислородных вакансий на поверхности (1,18 эВ) и в объёме WO_{3-x} (2,35 эВ).



а б

Рис. 2. (а) – спектры рассеяния в обратную полусферу наноструктурированного вольфрама (чёрная кривая), триоксида вольфрама до (синяя кривая) и после (красная кривая) воздействия УФ излучения. (б) – спектральная зависимость, иллюстрирующая поглощение вследствие фотохромного окрашивания WO_3.

Таким образом, в работе исследованы оптические свойства наноструктурированного оксида вольфрама и повторяемостью оптических свойств данной структуры, что показывает возможность применения его в качестве чувствительного элемента (рис. 3).

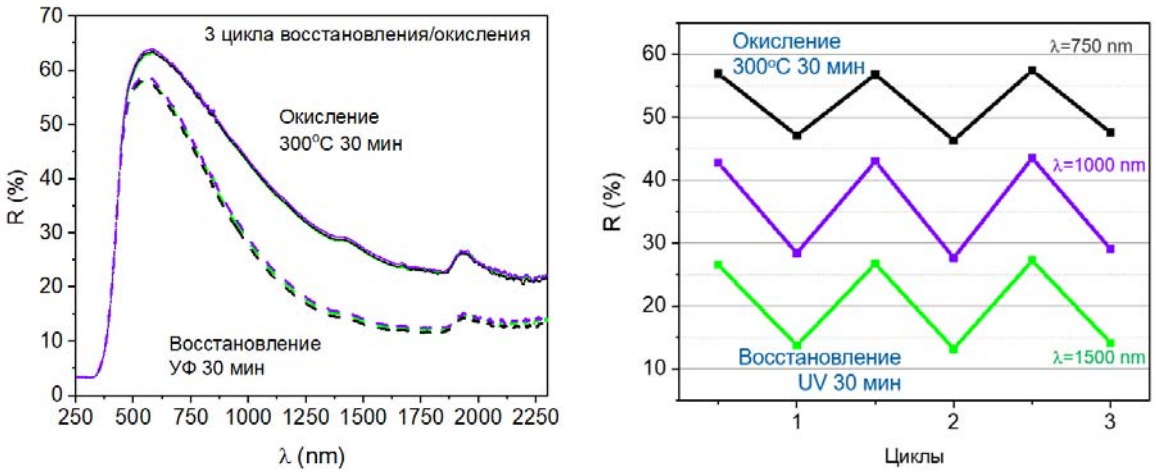


Рис. 3. Циклы восстановление и окисления наноструктурированного вольфрамового «пуха»

В рамках конференции будет обсуждаться газохромный отклик наноструктурированного вольфрамового «пуха» с платиновым катализатором в водородосодержащей газовой смеси.

Литература

1. Kajita, Shin & Ito, Atsushi & Ibano, Kenzo. (2022). Growth of fiberform nanostructures on metal surfaces by helium plasma irradiation. Journal of Applied Physics. 132. 181101. 10.1063/5.0123430.

2. Харьков М. М. и др. Магнетронное распыление вольфрамовых покрытий в дейтериево-гелиевых смесях // Высокотемпературные процессы в материаловедении. 2023. Т. 27. № 4. С. 25–32.

3. Kulikova, Daria & Baburin, Alexander & Amiraslanov, Ali & Lotkov, E.S. & Rodionov, Ilya & Pukhov, A. & Baryshev, Alexander & Dorofeenko, Alexander. (2023). Optical properties of ultrathin Pd and Pt films on a quartz substrate and on tungsten trioxide films. Journal of Radio Electronics. 2023. 10.30898/1684-1719.2023.12.7.

4. Garcia-Sanchez R. F. et al. Thermal Effects Associated with the Raman Spectroscopy of WO_3 Gas-Sensor Materials. The journal of physics chemistry A 117 (2013) 13825-13831.

5. Kulikova, Daria & Baburin, Alexander & Lotkov, E.S. & Rodionov, Ilya & Baryshev, Alexander. (2024). In-situ ellipsometric study of WO_{3-x} dielectric permittivity during gasochromic colouration. International Journal of Hydrogen Energy. 82. 767-775. 10.1016/j.ijhydene.2024.07.458.

ВЛИЯНИЕ НОСИТЕЛЯ НА АКТИВАЦИЮ РЕАГЕНТОВ В ПРОЦЕССЕ СЕЛЕКТИВНОГО ГИДРИРОВАНИЯ CO2

И. А. Подоляко
ignat@catalysis.ru

Институт катализа им. Г. К. Борескова Сибирского отделения РАН, Новосибирск

ПРИМЕНЕНИЕ ОПТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ КОРРЕЛЯЦИИ ЦИФРОВЫХ ИЗОБРАЖЕНИЙ ПРИ ИЗМЕРЕНИЯХ ДЕФОРМАЦИЙ КОНСТРУКЦИЙ, РАБОТАЮЩИХ ПОД ДАВЛЕНИЕМ ИЗОТОПОВ ВОДОРОДА

С. С. Сухова, А. И. Гуркин, А. Н. Дмитриенко

Российский федеральный ядерный центр — Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики, Саров

Оптические методы анализа полей перемещений и деформаций приобрели широкое распространение при исследованиях поведения материала конструкций различной формы, подвергаемых различными механическими воздействиями, включая работу под давлением изотопов водорода.

Одним из наиболее перспективных в настоящее время оптических методов является метод корреляции цифровых изображений (КЦИ).

В данной работе методом КЦИ исследовано напряженно-деформированное состояние (НДС) образца сборки в виде трубчатого элемента, подвергаемого ступенчатому нагружению внутренним давлением инертного газа до 10 МПа.

По результатам исследований проведен сравнительный анализ экспериментальных данных, полученных методом КЦИ, с тензометрическим методом и результатами аналитического решения. Результаты показали возможность применения метода КЦИ для исследований НДС различных конструкций, работающих под давлением изотопов водорода.

ТЯЖЕЛЫЕ ПСЕВДОСПЛАВЫ НА ОСНОВЕ ВОЛЬФРАМА – ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ МАТЕРИАЛ ДЛЯ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ В ТЕРМОЯДЕРНЫХ РЕАКТОРАХ

Б. Д. Чернышев[1,2*], *С. А. Мельников*[1], *В. В. Санин*[1], *П. Б. Басков*[3], *Р. В. Куржонков*[3]

**BDmChernyshev@rosatom.ru*

[1]Государственный научно-исследовательский и проектный институт редкометаллической промышленности им. Н. П. Сажина, Москва

[2]Национальный исследовательский технологический университет «Московский институт стали и сплавов», Москва

[3]Научно-исследовательский и конструкторский институт энерготехники им. Н. А. Доллежаля, Москва

Термоядерный реактор (ТЯР) предназначен для получения энергии за счет реакции синтеза тяжелых элементов из более легких изотопов. Существует проблема выбора материалов конструкций ТЯР и сформулированы требования к этим материалам [1]:

– высокая теплопроводность;

– стабильность термомеханических свойств в жестких условиях работы ТЯР;

– низкая величина распухания в процессе облучения;

– малые величины наведенной активности и быстрое ее снижение.

В настоящее время рассматриваются следующие материалы: Be, C и композиты на его основе, Li, W, ванадиевые сплавы системы V-Cr-Ti, стали с пониженной активацией и др., из которых наиболее перспективным является металлический вольфрам [2].

Изделия на основе W обладают низкой активностью под действием нейтронного облучения и высокой радиационной стойкостью.

Основным недостатком изделий из вольфрама является его хрупкость в силу технологических особенностей получения спеченного вольфрама (порошковая металлургия, наличие пор в структуре материала). Нейтронное облучение может повысить температуру хрупко-пластичного перехода до 700 °C, поэтому при рабочих условиях ТЯР вольфрамовая облицовка может оказаться хрупкой.

Считается, что изделия из вольфрама обладают высокой хрупкостью в силу технологических особенностей получения спеченного вольфрама (наличие пор в структуре материала). Повышение температуры до 700 °C может повысить температуру хрупко-пластичного перехода и вызвать охрупчивание вольфрамовой облицовки ТЯР. Все эти свойства вольфрамовых изделий могут быть скорректированы при использовании тяжелых сплавов на основе W, которые изготавливаются по методу порошковой технологии: подготовка шихтовых смесей порошков; смешивание компонентов; прессование порошков в заготовки заданной формы; спекание в контролируемой среде или в вакууме; механическая обработка. Содержание вольфрама в псевдосплавах составляет не менее 90–97 % масс. В качестве легирующих элементов используются металлические порошки Fe, Cu, Ni. Было установлено, что тяжелые сплавы обладают свариваемостью с нержавеющей сталью и прецизионными сплавами с образованием герметичных соединений.

Для улучшения физико-механических свойств и снижения активируемости материала от нейтронных потоков в тяжелые сплавы требуется вводить другие тугоплавкие тугоплавкие металлы (Re, Ta, Nb и др.).

Литература

1. Golubeva A. V., Kovalenko D. V., Lidzhigoryaev S. D. et al. Modification of Surfaces of Reduced-Activation Ferritic–Martensitic Steels upon Irradiation by Pulsed Deuterium Plasma with Parameters Typical for Peripheral Plasma Disruption. J. Surf. Investig. 16, 23–32 (2022). https://doi.org/10.1134/S1027451022010062.

2. Persianova A. P., Golubeva A. V. Hydrogen Traps in Tungsten: A Review. Phys. Metals Metallogr. 125, 278306 (2024). https://doi.org/10.1134/S0031918X23602895.

ИССЛЕДОВАНИЕ КАТАЛИЗАТОРОВ ГОМОМОЛЕКУЛЯРНОГО ИЗОТОПНОГО ОБМЕНА ВОДОРОДА МЕТОДОМ ТЕРМОПРОГРАММИРУЕМОГО ВОССТАНОВЛЕНИЯ

С. А. Ефимов, М. Б. Пшеницын, О. А. Боева*
**sir10.efimov@mail.ru*

Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, Москва, Россия

Исследование катализаторов гомомолекулярного изотопного обмена занимает важное место в работе с изотопами водорода. Отдельную группу среди них составляют катализаторы на основе металлических наночастиц, получаемых методом пропитки носителя растворами солей металлов с дальнейшим термическим разложением. Целью данной работы является изучение влияния природы металлов и способа их нанесения на свойства биметаллических частиц с помощью метода термопрограммируемого восстановления (ТПВ).

Метод ТПВ заключается в нагреве образца с постоянной скоростью (10 °С/мин) в среде водорода. Используется вариация методики в статических условиях с начальным давлением водорода ≈ 1 Торр.

В работе изучены катализаторы на основе наночастиц металлов I-Б группы: Ag, Au, Ag@Au, Au@Ag (получены последовательным нанесением металлов) и смешанные частицы Au_nAg_m (1:1, 1:3, 3:1) (получены совместным нанесением).

Показано, что свойства биметаллических наночастиц зависят не только от того, какие металлы наносятся, но и от последовательности их нанесения.

Подложка из Au у образца структуры «ядро-оболочка» Ag@Au в отличие от монометаллического Ag приводит к появлению второго пика восстановления.

Подложка из Ag у образца Au@Ag снижает температуру пика восстановления по сравнению с Au.

Образцы, полученные при совместном нанесении в разных соотношениях металлов, дают похожие результаты восстановления, кроме Au_nAg_m (3:1), что говорит об образовании схожих структур, в которых серебро выполняет стабилизирующую роль по отношению к процессу восстановления частиц золота.

Работа выполнена в рамках программы развития РХТУ им. Д. И. Менделеева «Приоритет-2030».

Научное издание

18-я Международная школа
Национального центра физики и математики
для молодых ученых и специалистов
им. А. А. Курдюмова

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ИЗОТОПОВ ВОДОРОДА С КОНСТРУКЦИОННЫМИ МАТЕРИАЛАМИ.

IHISM´25

Саров, 30 июня – 4 июля 2025 г.

СБОРНИК ТЕЗИСОВ

Печатается с оригинальных макетов авторов

Компьютерная подготовка оригинала-макета: *Моисеева Е. В.*

Подписано в печать 25.06.2025. Формат 60×84/8
Печать электрографическая. Усл. печ. л. ~8,95. Уч. изд. л. ~6,09
Тираж 90 экз. Зак. тип. 903-2025

Отпечатано в ИПЦ ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»
607188, г. Саров Нижегородской обл., ул. Силкина, д. 23