

ФГУП «Российский федеральный ядерный центр –
Всероссийский научно-исследовательский институт
экспериментальной физики»

FSUE «Russian Federal Nuclear Center –
All-Russian Research Institute of Experimental Physics»

**8-ая Международная конференция и
17-я Международная Школа
молодых ученых и специалистов им. А. А. Курдюмова**

**ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ИЗОТОПОВ ВОДОРОДА
С КОНСТРУКЦИОННЫМИ МАТЕРИАЛАМИ.**

IHISM '24 Junior

Саров, 30 июня – 06 июля 2024 г.

СБОРНИК ТЕЗИСОВ



**8th International Conference and
17th International School for Young Scientists named after
A. A. Kurdyumov**

**INTERACTION OF HYDROGEN ISOTOPES
WITH STRUCTURAL MATERIALS.**

IHISM '24 Junior

Sarov, 30 June – 06 July, 2024

BOOK OF THESES

2024

Взаимодействие изотопов водорода с конструкционными материалами. IHISM'24 Junior. Сборник тезисов Восьмой Международной конференции и Семнадцатой Международной Школы молодых ученых и специалистов им. А. А. Курдюмова. Под редакцией доктора технических наук А. А. Юхимчука – Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2024.

Сборник содержит тезисы докладов, представленных на Восьмую Международную конференцию и Семнадцатую Международную Школу молодых ученых и специалистов им. А. А. Курдюмова. «Взаимодействие изотопов водорода с конструкционными материалами. IHISM'24 Junior». 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.

Interaction of Hydrogen Isotopes with Structural Materials. IHISM'24 Junior. The Book of Abstracts at the 8th International Conference and 17th International School for young scientists named after A. A. Kurdyumov. Edited by Dr. A. A. Yukhimchuk – Sarov, RFNC-VNIIEF, 2024.

The Book contains the abstracts of presentations at the 8th International Conference and 17th International School for young scientists named after A. A. Kurdyumov «Interaction of Hydrogen Isotopes with Structural Materials. IHISM'24 Junior». The abstracts concern the following topics: kinetics and thermodynamics of the interaction of hydrogen isotopes with solids, including the effects of radiogenic helium; mechanical properties and structural transformations of structural materials in a hydrogen environment; hydrides and hydride transformations; equipment and research methods.

Печатается с оригинальных текстов авторов
Printed using the original texts by the authors

Составители:

Н. В. Кокоулина, Ал. А. Юхимчук

Complilers:

N. V. Kokoulina, Al. A. Yukhimchuk

© ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 2024

Организаторы:

Национальный Центр Физики и Математики (НЦФМ)

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

Vigor TRITIUM RETENTION SYSTEMS



Н Ц Ф М



РФЯЦ-ВНИИЭФ

РОСАТОМ

Vigor

TRITIUM RETENTION SYSTEMS

Sponsors:

National Centre for Physics and Mathematics

FSUE «RFNC-VNIIEF»

Vigor TRITIUM RETENTION SYSTEMS

Международный программный комитет**Председатель:**

Илькаев Р. И. – почетный научный руководитель РФЯЦ-ВНИИЭФ, академик РАН;

Заместитель председателя:

Юхимчук А. А. – д.т.н., РФЯЦ-ВНИИЭФ, Россия

Члены комитета:

Алексеев И. А. – НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Россия;
Бисикало Д. В. – академик РАН, НЦФМ, Россия;
Беграмбеков Л. Б. – проф., НИЯУ МИФИ, Россия;
Вербецкий В. Н. – проф., МГУ, Россия;
Воронин В. В. – проф., НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Россия;
Денисов Е. А. – к.ф.-м.н., доцент СПбГУ, Россия;
Заика Ю. В. – проф., д.ф.-м.н., «КарНЦ РАН», Россия;
Ковалишин А. А. – член-корр. РАН, НИЦ «Курчатовский институт», Россия;
Лившиц А. И. – проф., СПбГУТ, 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;
Постников А. Ю. – к.т.н., ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», Россия;
Спицын А. В. – к.ф.-м.н., НИЦ «Курчатовский институт», Россия;
Тажибаева И. Л. – проф., ИАЭ НЯЦ РК, Казахстан;
Хапов А. С. – к.т.н., ВНИИА им. Н. Л. Духова, Россия

Секретарь:

Бучирин Алексей Вячеславович – РФЯЦ-ВНИИЭФ, Россия
тел. 8 (83130) 2 45 99
e-mail: arkad@triton.vniief.ru

Исполнительный комитет**Председатель:**

Москалев О. А. (ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»)

Заместитель председателя:

Максимкин И. П. (ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»)

Члены комитета:

Бондаренко С. Д. (НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ)

Бучирин А. В. (ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»);

Васильев А. В. (ГК «Росатом»);

Воронцова О. С. (ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»);

Гевлич А. Н. (ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»);

Голубева А. В. (НИЦ «Курчатовский институт»);

Мионов В. Е. (ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»);

Пешехонова О. Ф. (ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»);

Сенягина М. Н. (РФЯЦ-ВНИИЭФ);

Тарасов С. В. (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»)

Секретари:

Царева Ирина Алексеевна (ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»)

т. 8 (83130) 2-46-89;

Феоктистова Ирина Сергеевна (ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»)

т. 8 (83130) 2-46-05

e-mail: arkad@triton.vniief.ru

Тематика Школы

- 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.

Program Committee

Co-Chairs:

Ilkaev R. I. – Honorary Scientific Director of the RFNC-VNIIEF, Academician of the Russian Academy of Sciences

Deputy Co-Chairs:

Yukhimchuk A. A. – Doctor of Technical Sciences, RFNC-VNIIEF, Russia

Committee members:

Alekseev I. A. – Research Center «Kurchatov Institute» – PNPI, Russia;

Bisikalo D. V. – Academician RAS, NCFM, Russia;

Begrambekov L. B. – Professor, NRU MEPhI, Russia;

Verbetsky V. N. – Professor, Moscow State University, Russia;

Voronin V. V. – Professor, Research Center «Kurchatov Institute» – PNPI, Russia;

Denisov E. A. – Ph.D., Associate Professor of SPbSU, Russia;

Zaika Yu. V. – Professor, Doctor of Ph.D., «KarSC RAS», Russia;

Kovalishin A. A. – Corresponding Member RAS, Research Center «Kurchatov Institute», Russia;

Lifshits A. I. – Professor, SPbSUT, Russia;

Magomedbekov E. P. – Ph.D., RCTU, Russia;

Netskina O. V. – Ph.D, IC SB RAS, Russia;

Pisarev A. A. – Professor, NRU MEPhI;

Postnikov A. Yu. – Ph.D., RFNC-VNIIEF, Russia;

Spitsyn A. V. – Ph.D., Research Center «Kurchatov Institute», Russia;

Tazhibayeva I. L. – Professor, IAE NNC RK, Kazakhstan;

Khapov A. S. – Ph.D., N. L. Dukhov VNIIA, Russia

Secretary:

Buchirin Alexey Vyacheslavovich – RFNC-VNIIEF, Russia

tel. 8 (83130) 2 45 99

e-mail: arkad@triton.vniief.ru

Executive Committee**Chairman:**

Moskalev O. A. FSUE «RFNC-VNIIEF»

Deputy Chairman:

Maksimkin I. P. FSUE «RFNC-VNIIEF»

Committee members:

Bondarenko S. D. Research Center «Kurchatov Institute» – PNPI;

Buchirin A. V. FSUE «RFNC-VNIIEF»;

Vasiliev A. V. Rosatom State Corporation;

Vorontsova O. S. FSUE «RFNC-VNIIEF»;

Gevlich A. N. FSUE «RFNC-VNIIEF»;

Golubeva A. V. Research Center «Kurchatov Institute»;

Mironov V. E. FSUE «RFNC-VNIIEF»;

Peshekhonoova O. F. FSUE «RFNC-VNIIEF»;

Senyagina M. N. FSUE «RFNC-VNIIEF»;

Tarasov S. V. FSUE «RFNC-VNIIEF»;

Tivikova O. A. FSUE «RFNC-VNIIEF»;

Chuvikovskiy A. V. FSUE «RFNC-VNIIEF»;

Shishkova T. A. Research Center «Kurchatov Institute»;

Yukhimchuk Al. A. FSUE «RFNC-VNIIEF»

Secretaries:

Tsareva Irina Alekseevna FSUE «RFNC-VNIIEF»

tel. 8 (83130) 2-46-89;

Feoktistova Irina Sergeevna FSUE «RFNC-VNIIEF»

tel. 8 (83130) 2-46-05

e-mail: arkad@triton.vniief.ru

School topics:

- Kinetics and thermodynamics of the interaction of hydrogen isotopes with solids, including the effects of radiogenic helium.
- Mechanical properties and structural transformations of structural materials in a hydrogen environment.
- Hydrides and hydride transformations.
- Equipment and research methods.

ПРЕДИСЛОВИЕ

В 2024 году мы проводим 8-ю Международную конференцию и 17-ю Международную Школу по тематике «Взаимодействие изотопов водорода с конструкционными материалами. IHISM'24».

История настоящего мероприятия берет свое начало с 1999 года, когда в г. Саров с 17 по 25 мая был проведен Международный семинар «Потенциал российских ядерных центров и МНТЦ в тритиевых технологиях». Помимо специалистов в области тритиевых технологий на семинар собралось большое количество специалистов работающих по тематике взаимодействия водорода с материалами. Следует отметить, что в СССР успешно проводился Всесоюзный семинар по данной тематике. На семинаре 1999 года было принято решение об организации Международного семинара «Взаимодействие изотопов водорода с конструкционными материалами». Первый такой семинар прошел в г. Саров в 2001 году. На Втором международном семинаре (г. Саров, 2004 г.), ввиду его исключительно высокой популярности, было принято решение о повышении статуса семинара и он был преобразован в Международную конференцию. Там же было принято решение об организации Международной Школы с одноименным названием.

Первые Международные Школы IHISM Junior были проведены в 2005 и 2006 годах на базе учебного центра «Урозера» Карельского Государственного университета под Петрозаводском (председатель локального организационного комитета профессор Ю. В. Заика) и стали очень популярны в среде молодых ученых, занимающихся водородной тематикой. С 2008 года Школа носит имя великого ученого и организатора, профессора Санкт-Петербургского Государственного университета А. А. Курдюмова, стоявшего у истоков ее организации.

Фиксированного места проведения конференции и Школы не существует – ее организаторами сразу же был выбран передвижной стиль проведения. При этом было принято решение о проведении конференции с периодичностью 2-3 года, а Школы ежегодно. За это время 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, 20014, 2019 и 2023 гг.), в Воронеже (2010 г.), в Звенигороде (2011 г.), в Москве (2015 г.), Протвино (2017 г.), Гатчине (2021 г.) и Окуловке (2022 г.).

Таким образом, можно считать, что сегодняшнее мероприятие является юбилейным – сегодня мы можем отмечать 25-летний юбилей его организации.

На 8-й Международной конференции 17-й Международной Школе «Взаимодействие изотопов водорода с конструкционными материалами. IHISM'24» будут представлены приглашённые доклады и специальные лекции ведущих специалистов, а также доклады молодых ученых по широкому кругу вопросов, связанных с тематикой Школы.

Оргкомитет благодарит за помощь в организации Школы и спонсорскую поддержку ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ» и Госкорпорацию «Росатом», Национальный центр физики и математики (НЦФМ), за активное участие в организации Школы.

Желаем Вам успешной плодотворной работы, интересных встреч, приятного и полезного общения.

Оргкомитет

FOREWORD

The 17th International School «Interaction of Hydrogen Isotopes with Structural Materials. IHISM'24» and the 8th International Conference are held in 2024.

The history of this event dates back to 1999, when the International Seminar «The potential of Russian Nuclear Centers and ISTC in Tritium Technologies» was held in Sarov from May 17 to 25. In addition to specialists in the field of tritium technologies, a large number of specialists working on the topic of hydrogen interaction with materials gathered at the seminar. It should be noted that the All-Union seminar on this topic was successfully held in the USSR. At the seminar of 1999 it was decided to organize the International Seminar « Interaction of Hydrogen Isotopes with Structural Materials». The first seminar was held in Sarov in 2001. At the second International Seminar (Sarov, 2004), due to its extremely high popularity, it was decided to upgrade the status of the seminar and it was transformed into an International Conference. It was also decided to organize an International School of the same name.

The first IHISM Junior International Schools were held in 2005 and 2006 on the basis of «Urozero» training center of Karelian State University near Petrozavodsk (chairman of the local organizing committee Professor Yu. V. Zaika) and became very popular among young scientists engaged in hydrogen topics. Since 2008, the School has been named after the great scientist and organizer Professor of St. Petersburg State University A. A. Kurdyumov being the institutor of its organization.

There is no fixed location to hold the School – its organizers immediately chose the mobile style of holding the School. At the same time, it was decided to hold the Conference at 2-3 year intervals and the Schools annually. Over this period, the School was held: in Petrozavodsk (2005, 2006 and 2016), in Saint-Petersburg (2007), on the motor ship «Georgy Zhukov» (2008 and 2012), in Sarov (2009, 2014, 2019 and 2023), in Voronezh (2010), in Zvenigorod (2011), in Moscow (2015), in Protvino (2017), in Gatchina (2021) and Okulovka (2022).

Thus, we can assume that today's event is an anniversary – today we celebrate the 25th anniversary of its organization.

The 8th International Conference and the 17th International school «Interaction of Hydrogen Isotopes with Structural Materials. IHISM'24» will feature invited reports and special lectures by leading specialists, as well as reports of young scientists on a wide range of issues of the School.

The organizing committee thanks FSUE «RFNC-VNIIEF» and Rosatom State Corporation for the assistance in organizing the School and sponsorship support, as well as the National Center for Physics and Mathematics (NCPM) for an active participation in organizing the School.

We wish you every success and efficient work, exciting meetings, pleasant and useful communications.

Organizing Committee

СОДЕРЖАНИЕ

CONTENTS

Приглашенные доклады

A1. Бисикало Д. В. Научная программа Национального центра физики и математики <i>Bisikalo D. V.</i> Scientific program of the national center for physics and mathematics	28 28
A2. Юхимчук А. А. Направление «Физика изотопов водорода» Национального центра физики и математики. Результаты 2023 года <i>Yukhimchuk A. A.</i> Project «Physics of hydrogen isotopes» of the National center for physics and mathematics results 2023	29 30
A3. М. Кадедду, Ф. Дордеи, К. Джунти, А. Ивашкин, К. Кузаков и др. Статус и перспективы тритиевого нейтринного эксперимента SATURNE <i>M. Cadeddu, F. Dordei, C. Giunti, Al. Ivashkin, K. Kouzakov et al.</i> Status and prospects of the SATURNE tritium neutrino experiment	31 33
<i>1. Кинетика и термодинамика взаимодействия изотопов водорода с твердыми телами, включая эффекты радиогенного гелия</i> <i>1. Kinetics and thermodynamics of the interaction of hydrogen isotopes with solids, including the effects of radiogenic helium</i>	
A4. Заика Ю. В. Гибридная модель термодесорбции водорода из конструкционных материалов <i>Zaika Yu. V.</i> Hybrid model of hydrogen thermal desorption from structural materials ...	36 37

<hr/>	
A5. <i>Крат С. А., Пришвицын А. С., Фефелова Е. А., Васина Я. А. и др.</i> Со-осаждение как путь накопления водорода в токамаках: опасность, физика, решения	39
<i>Krat S. A., Prishvitsyn A. S., Fefelova E. A., Vasina Ya. A. et al.</i> Co-deposition as hydrogen accumulation channel in tokamaks: danger, physics, solutions	41
B1. <i>Мусяев Р. К., Вертей А. В., Малков И. Л., Бучирин А. В.</i> Водородопроницаемость мембранных образцов сплава ВТ6, полученных аддитивным методом послойного лазерного спекания ...	44
<i>Musyaev R. K. Vervey A. V., Malkov I. L., Buchirin A. V.</i> Hydrogen permeability of membrane samples of VT6 alloy, obtained by additive method of selective laser melting	45
B2. <i>Трифонов С. А., Алексеев И. Е., Калинин В. А., Родионов С. А.</i> Центр циклотронных технологий на базе АО «Радиевый институт им. В. Г. Хлопина»: фундаментальные и прикладные исследования ...	46
<i>Trifonov S. A., Alekseev I. E., Vanin A. V., Kalinin V. A., Rodionov S. A.</i> Center for cyclotron technologies based on JSC «Radium institute named after V. G. Khlopin»: fundamental and applied research	48
B3. <i>Т. В. Кульсартов, Е. В. Чихрай, С. К. Аскербеков,</i> <i>А. Шаймерденов, Ж. Заурбекова, И. Кенжина</i> Особенности экспериментов по исследованию наработки и выделения трития из литийсодержащих керамик на реакторе ВВРК	49
<i>T. V. Kulsartov, Ye. V. Chikhray, S. K. Askerbekov,</i> <i>A. A. Shaimerdenov, Zh. A. Zaurbekova, I. Ye. Kenzhina</i> Features of experiments to study the production and release of tritium from lithium-containing ceramics at the WWR-K reactor	50
B4. <i>Елишенков А. Б., Чихрай Е. В., Кульсартов Т. В., Кенжина И. Е.,</i> <i>Заурбекова Ж. А., Аскербек С. К., Кенжин Е. А.</i> Эксперименты по исследованию взаимодействия водорода с бериллидом ниобия Be_2Nb_3	52
<i>Yelishenkov A. B., Chikhray Ye. V., Kulsartov T. V., Kenzhina I. Ye.,</i> <i>Zaurbekova Zh. A., Askerbekov S. K., Kenzhin Ye. A., Udartsev S. V.</i> Experiments to study the interaction of hydrogen with niobium beryllide Be_2Nb_3	54

A6. Маклашова И. В., Богданова Ю. А., Алейников А. Ю., Селезенев А. А., Королев В. Ю.	
Разработка уравнения состояния изотопов водорода и их смесей с гелием методами термодинамики и молекулярной динамики	56
<i>Maklashova I. V., Bogdanova Yu. A., Aleynikov A. Yu., Selezenev A. A., Korolev V. Yu.</i>	
Development of the equation of state of hydrogen isotopes and their mixtures with helium by methods of thermodynamics and molecular dynamics	58
B5. Богданова Ю. А., Маклашова И. В., Сураева А. А.	
Молекулярно-динамическое моделирование диффузии водорода в металлах	60
<i>Bogdanova Yu. A., Maklashova I. V., Suraeva A. A.</i>	
Molecular dynamics modeling of hydrogen diffusion in metals	61
C1. Персианова А. П., Голубева А. В., Ефимов В. С.	
Моделирование захвата дейтерия в стали ЭК-181	63
<i>Persianova A., Golubeva A., Efimov V. S.</i>	
Modeling of deuterium retention in EK-181 steel	64
C2. Шишкова Т. А., Черкез Д. И., Голубева А. В., Степанов Н. О., Бобырь Н. П., Козлов Д. А., Дугин Д. С., Розенкевич М. Б., Чернов В. М.	
Изотопный обмен водорода в стали ЭК-181	66
<i>Shishkova T., Cherkez D., Golubeva A., Stepanov N., Bobyr N., Kozlov D., Dugin D., Rozenkevich M., Chernov V.</i>	
Hydrogen isotope exchange in EK-181 steel	67
C3. Родченкова Н. И., Заика Ю. В.	
Численное моделирование водородопроницаемости с экспоненциально зависимым от концентрации коэффициентом диффузии	69
<i>Rodchenkova N. I., Zaika Yu. V.</i>	
Numerical modeling of hydrogen permeability. With exponentially concentration-dependent diffusion coefficient	70

C4. Костикова Е. К., Заика Ю. В.

Оценка поверхностных параметров термодесорбции водорода
методом сопряженных уравнений 72

Kostikova E. K., Zaika Yu. V.

Estimation of surface parameters of hydrogen thermodesorption.
By the method of conjugate equations 74

C5. Егоров А. А., Богданова Ю. А., Маклашова И. В.

Реализация методики расчета коэффициентов переноса для
газовых смесей изотопов водорода и гелия с использованием
молекулярно-динамического моделирования 76

Egorov A. A., Bogdanova Yu. A., Maklashova I. V.

Implementation of a methodology for calculation of the transport
coefficients for gas systems containing helium and hydrogen
isotopes using molecular dynamics simulation 77

C6. Смаль А. С., Богданова Ю. А., Маклашова И. В.,

Королев В. Ю., Селезенев А. А.

Применение методов квантового молекулярно-динамического
моделирования для исследования свойств изотопов водорода
и их взаимодействия с поверхностью металлов 79

*Smal A. S., Bogdanova Yu. A., Maklashova I. V., Korolev V. Yu.,
Selezenev A. A.*

Application of the methods of quantum molecular dynamic
modeling to study the properties of hydrogen isotopes
and their interaction with metal surfaces 80

C7. Кузенов С. Р., Алимов В. Н., Буснюк А. О., Лившиц А. И.,

Передистов Е. Ю.

Влияние углеродсодержащих газов на производительность
мембран из металлов 5 группы с защитно-каталитическим
палладиевым покрытием 82

*Kuzenov S. R., Alimov V. N., Busnyuk A. O., Livshits A. I.,
Peredistov E. Yu.*

The influence of carbonaceous gases on the performance
of membranes made of group 5 metals with catalytic pd coating 84

С8. Ефимов С. А., Боева О. А.

Влияние среды водорода на процесс разложения прекурсоров
металлических нанокатализаторов гомомолекулярного
изотопного обмена 86

Efimov S. A., Boeva O. A.

Influence of a hydrogen environment on the process of decomposition of
precursors of metal nanocatalysts of homomolecular isotope exchange 87

**2. Механические свойства и структурные превращения
конструкционных материалов в среде водорода**
**2. Mechanical properties and structural transformations
of structural materials in a hydrogen environment**

А7. Чувильдеев В. Н.

Неравновесные границы зерен. Теория и приложения 90

Chuvil'deev V. N.

Non-equilibrium grain boundaries. theory and applications 91

**А8. Литовченко И. Ю., Полехина Н. А., Аккузин С. А.,
Спиридонова К. В., Осипова В. В., Ким А. В., Чернов В. М.**

Малоактивируемые аустенитные стали 93

*Litovchenko I. Yu., Polekhina N. A., Akkuzin S. A., Spiridonova K. V.,
Osipova V. V., Kim A. V., Chernov V. M.*

Low-activation austenitic steels 94

А9. Канащенко С. Л.

Взаимодействие изотопов водорода с графитом. Обзор 96

В6. Голубева А. В.

Вольфрам как материал защитной облицовки камеры
термоядерного реактора – обзор проблем и путей их решения 98

Golubeva A. V.

Tungsten as plasma-facing material of a fusion reactor –
an overview of problems and ways to solve them 99

В7. Максимкин И. П., Юхимчук А. А., Малков И. Л., Бойцов И. Е., Балуев В. В., Шевнин Е. В., Шотин С. В., Чувильдеев В. Н., Грязнов М. Ю.	
Влияние водорода на механические свойства стали 316L и сплава Inconel 718, полученных методом послойного лазерного сплавления	101
<i>Maksimkin I. P., Yukhimchuk A. A., Malkov I. L., Boytsov I. E., Baluev V. V., Shevnin E. V., Shotin S. V., Chuvildeev V. N., Gryazno M. Yu.</i>	
Effect of hydrogen on mechanical properties of 316L steel and Inconel 718 alloy, obtained by selective laser melting method	103
В8. Бойцов И. Е., Бучирин А. В., Максимкин И. П., Шевнин Е. В., Юхимчук А. А., Грязнов М. Ю., Чувильдеев В. Н.	
Влияние воздействия водорода на механические свойства титанового сплава ВТ6, полученного методом послойного лазерного сплавления	105
<i>Boytsov I. E., Buchirin A. V., Maksimkin I. P., Shevnin E. V., Yukhimchuk A. A., Gryaznov M. Yu., Chuvildeev V. N.</i>	
Effect of hydrogen exposure on mechanical properties of ВТ6 titanium alloy obtained by selective laser melting method	106
В9. Малков И. Л.	
Исследование структуры конструкционных материалов, изготовленных методом послойного лазерного сплавления, после испытаний в среде водорода	107
<i>Malkov I. L.</i>	
Study of the structural materials produced by selective laser melting method	108
3. Гидриды и гидридные превращения	
3. Hydrides and hydride transformation	
А10. Денисов Е. А., Громов Е. П., Дмитриев В. А., Селиванов А. А.	
Метод водородопроницаемости для определения предельной растворимости водорода в гафнии	112
<i>Denisov E. A., Gromov E. P., Dmitriev V. A., Selivanov A. A.</i>	
Hydrogen permeability method for determining the terminal solid solubility of hydrogen in hafnium	113

A11. Нецкина О. В.

Гидридные источники водорода и области их применения 115

Netskina O. V.

Hydride hydrogen sources and their applications 117

B10. Голубков А. Н.Исследование Р-Т-С соотношений для гидрида и дейтерида титана
в области давлений до 300 МПа и температур до 978 К 119*Golubkov A. N.*Study of P-T-C ratios for titanium hydride and deuteride in the pressure
range up to 300 MPa and temperatures up to 978 K 120**С9. Савотин И. М., Бердоносова Е. А., Клямкин С. Н., Король А. А.**Особенности гидридообразования высокоэнтропийных сплавов
системы Ti-Zr-V-Nb-Ta-Hf 121**B11. Терёшина И. С.**Магнитные свойства гидридов интерметаллических соединений
в слабых, сильных и сверхсильных магнитных полях 123*Tereshina I. S.*Magnetic properties of hydrides of intermetallic compounds
in weak, high and ultrahigh magnetic fields 125**С10. Анжигатова Е. Д., Эльман Р. Р., Кудияров В. Н., Лидер А. М.**Разработка системы хранения водорода на основе сплава
титан-железо с частичным замещением железа на марганец 127*Anzhigatova E. D., Kudiyarov V. N., Elman R. R., Lider A. N.*Development of hydrogen storage system on the basis of titanium-iron
alloy with partial replacement of iron by manganese 128**С11. Курганская А. А., Лю Чжэ, Терёшина И. С., Митрохин С. В.**Новые водородосодержащие материалы для магнитного
охлаждения в области криогенных температур 130*Kurganskaya A. A., Liu Zh., Tereshina I. S., Mitrokhin S. V.*New hydrogen-containing materials for magnetic cooling
in the cryogenic temperature range 132

C12. Санин В. В., Мельников С. А., Солнцева Е. Б.	
Особенности металлургии специальных сплавов с высоким содержанием титана, включая металлогидридные материалы	134
<i>Sanin V. V., Melnikov S. A., Solntseva E. B.</i>	
Metallurgy of special alloys with high titanium content, including metal hydride materials	135
C13. Военнов А. В., Хапов А. С., Чеканов С. В.	
Ориентационный эффект потока нейтронов для пленок титанового гидрида	137
<i>Voennov A. V., Kharov A. S., Chekanov S. V.</i>	
Orientation effect of neutron flux for titanium hydride films	138
C14. Сомкина Е. В., Костылева А. А., Тарасов А. А., Белова Ю. С., Шатунов В. Е.	
Влияние видов обработки на шероховатость поверхности прессованных образцов из гидрида лития	139
<i>Somkina E. V., Kostyleva A. A., Tarasov A. A., Belova Yu. S., Shatunov V. E.</i>	
Effect of treatments on surface roughness of pressed lithium hydride samples	140
4. Аппаратура и методы исследования	
4. Equipment and research methods	
A12. Ананьев С. С.	
Язык сопряжения теории и эксперимента в физике плазмы с технологическими процессами во вспомогательных системах топливного цикла установки токамак	144
<i>Ananyev S.</i>	
The language of coupling theory and experiment in plasma physics with technological processes in the fuel cycle systems of the tokamak facility	147
A13. Бондаренко С. Д., Алексеев И. А., Васянина Т. В., Федорченко О. А.	
Адаптация электролизеров для работы с тяжелой водой	150
<i>Bondarenko S. D., Alekseev I. A., Fedorchenko O. A., Vasyanina T. V.</i>	
Adaptation of electrolyzers for working with heavy water	151

A14. *Варежкин А. В.*

Разработка полимерной мембраны в форме асимметричного полого волокна для выделения водорода из газовых смесей 153
Varezhkin A.

Development of an asymmetric hollow-fiber polymer membrane for hydrogen separation from gas mixtures 155

B12. *Рогожина М. А., Зарубина Е. Ю., Чугров И. А.*

Криогенная мишень непрямого облучения для ЛТС 157

B13. *Бобырь Н. П., Кочкин В. Н., Решетников А. А., Песня Ю. Е.*

Последовательность подготовки нейтронно облученных образцов материалов ТЯР к исследованию захвата дейтерия 159
Bobyry N., Kochkin V., Reshetnikov A., Pesnya Yu.

Steps of preparation of neutron irradiated samples of FR materials for the study of deuterium capture 160

B14. *Черкез Д. И., Степанов Н. О., Козлов Д. А., Шишкова Т. А., Дугин Д. С., Спицын А. В.*

Установки для исследования взаимодействия плазмы с материалами ЛВГПИМ НИЦ «Курчатовский институт» 162
Cherkez D. I., Stepanov N. O., Kozlov D. A., Shishkova T. A., Dugin D. S., Spitsyn A. V.

Installations for plasma-material interaction investigation in LIGPM National Research Center «Kurchatov Institute» 164

B15. *Розенкевич М. Б., Букин А. Н., Марунич С. А., Пак Ю. С.*

Проблема использования катализаторов при детритизации газа в условиях возникновения пожара 166
Rozenkevich M. B., Bukin A. N., Marunich S. A., Pak Yu. S.

The problem of using catalysts for gas detritiation in fire conditions 167

B16. *Чуканов А. Н., Яковенко А. А., Цой Е. В., Моденов М. Ю.*

Автоматизация измерений внутреннего трения в сплавах различного производства 169
Chukanov A. N., Yakovenko A. A., Tsoi E. V., Modenov M. Yu.

Automation of internal friction measurements in alloys of various production 172

- В17.** *Мусяев Р. К., Максимкин И. П., Юхимчук А. А., Балугев В. В., Кирдяшкин А. А., Тивикова О. А., Рыжухина А. В., Першина В. М., Буряк Е. В., Вертей А. В., Гуркин А. И., Вихлянцев О. П., Фильчагин С. В.*
 Система тритиевого обеспечения для исследований нейтронно-избыточных ядер на фрагмент-сепараторе АКУЛИНА-2 175
Musyayev R. K., Maksimkin I. P., Yukhimchuk A. A., Baluev V. V., Kirdyashkin A. A., Tivikova O. A., Ryzhukhina A. V., Pershina V. M., Buryak E. V., Verthey A. V., Gurkin A. I., Vikhlyantsev O. P., Filchagin S. V.
 Tritium support system for neutron-excess nuclei at fragment-separator ACCULINNA-2 176
- С15.** *Бакулин Д. В., Балдин В. Д., Бирюков А. Н., Родченков Б. С., Терешин С. Н., Коневец М. В., Шутько К. И.*
 Наводораживание циркониевых частей каналов СУЗ РБМК-1000 177
Bakulin D. V., Baldin V. D., Biryukov A. N., Rodchenkov B. S., Tereshin S. N., Konevets M. V., Shutko K. I.
 The hydrogenation of zirconium parts in the RBMK-1000 reactor control and protection system channels 178
- С16.** *Шишалова Г. В., Кобылянский Г. П., Волкова И. Н.*
 Сравнительный анализ экспериментальных данных, полученных методом ступенчатого нагрева и расчетным методом при определении содержания водорода в металле и оксидных пленках облученных циркониевых сплавов 179
Shishalova G. V., Kobylansky G. P., Volkova I. N.
 Comparative analysis of experimental data obtained both by gradual heating method and by calculations to determine hydrogen content in metal and oxide films of the irradiated zirconium alloys 180
- С17.** *Кузьмин Д. А., Федорченко О. А., Брык А. А., Алексеев И. А.*
 Изучение способов регенерации гидрофобного платинового катализатора РХТУ-ЗСМ, используемого в установках разделения изотопов водорода НИЦ КИ – ПИЯФ 182
Kuzmin D. A., Fedorchenko O. A., Bryk A. A., Alekseev I. A.
 Study of methods for regeneration the hydrophobic platinum catalyst RCTU-3SM that used in hydrogen isotope separation units of national earesearch center «Kurchatov Institute» – PNPI 183

C18. <i>Синяков М. В., Спасов Д. Д., Менишарпов Р. М., Засыпкина А. А., Иванов Б. В., Иванова Н. И.</i>	
Исследование влияния водородного насыщения титановых коллекторов тока на электрохимические характеристики электролизера воды с ПОМ	184
<i>Sinyakov M. V., Spasov D. D., Mensharapov R. M., Zasypkina A. A., Ivanov B. V., Ivanova N. A.</i>	
Investigation of the influence of titanium current collectors charged with hydrogen on performance of water electrolyzer with PEM	186
C19. <i>Слатинская Л. С.</i>	
Определение содержания трития в производственных отходах, образующихся при изготовлении нейтронных трубок	187
<i>Slatinskaya L. S.</i>	
Tritium content determination in waste generated during neutron tubes for tritium generators manufacture	188
C20. <i>Смирнова Е. В., Медведев О. С., Раздобарин А. Г., Елец Д. И., Снигирев Л. А., Шубин Я. Р.</i>	
Количественный анализ содержания изотопов водорода в материалах первой стенки токамака методом оптической спектроскопии пеннинговского разряда	189
<i>Smirnova E. V., Medvedev O. S., Razdobarin A. G., Elets D. I., Snigirev L. A., Shubin I. R.</i>	
A quantitative analysis of hydrogen isotope retention in tokamak first wall materials by penning discharge optical spectroscopy	191
C21. <i>Кучеров О. А., Аникин А. С., Тарасов В. Р., Чекушин Р. В., Лизунов А. В., Семенов А. А., Беляков М. И., Забирова Н. Е., Голенок А. С., Букин А. Н., Козлова Е. В.</i>	
Испытание блока химической конверсии окисленных форм трития в системе газоочистки ИЖСР	193
C22. <i>Юхимчук Ал. А., Балыев В. В., Бучирин А. В., Дьянов Н. Ю., Кирдяшкин А. А., Максимкин И. П., Малков И. Л., Мусьяев Р. К., Юхимчук А. А.</i>	
Тритиевые мишени для изучения свойств нейтронно-избыточных ядер	195
<i>Yukhimchuk Al. A., Baluev V. V., Buchirin A. V., Dyanov N. Yu., Kirdyashkin A. A., Maksimkin I. P., Malkov I. L., Musyaev R. K., Yukhimchuk A. A.</i>	
Tritium targets for study of neutron-excess nuclei properties	196

C23. <i>Викулов Д. Д., Харьковская С. А., Вораксо И. А., Чеботов А. Ю., Растунова И. Л.</i>	
Определение содержания дейтерия в хлороформе методом ИК-Фурье спектроскопии в широкой области концентраций	197
<i>Vikulov D. D., Kharkova S. A., Vorakso I. A., Chebotov A. Yu., Rasunova I. L.</i>	
Determination of deuterium content in chloroform by FTIR spectrometry in a wide concentration area	199
 C24. <i>Вораксо И. А., Чеботов А. Ю., Растунова И. Л., Попов А. С., Кузьмин А. А.</i>	
Влияние состояния мембраны на массообменные характеристики химического изотопного обмена между водой и водородом в мембранных контактных устройствах	201
<i>Vorakso I. A., Chebotov A. Yu., Rasunova I. L., Kuzmin A. A. Popov A. S.</i>	
The influence of the membrane state on the mass transfer characteristics of chemical isotope exchange between water and hydrogen in membrane contact devices	203
 C25. <i>Пшеницын М. Б., Боева О. А.</i>	
Изомерная конверсия протия и изотопный обмен в молекулярном водороде на каталитических системах, содержащих наночастицы металлов 1-Б группы	205
<i>Pshenitsyn M. B., Boeva O. A.</i>	
Isomeric conversion of protium and isotope exchange in molecular hydrogen on catalytic systems containing nanoparticles of metals of the group 1 B	206

A1–A3

ПРИГЛАШЕННЫЕ ДОКЛАДЫ

INVITED REPORTS

Бисикало Д. В.

Заместитель научного руководителя НЦФМ –
Главный ученый секретарь НЦФМ,
академик РАН



НАУЧНАЯ ПРОГРАММА НАЦИОНАЛЬНОГО ЦЕНТРА ФИЗИКИ И МАТЕМАТИКИ

Д. В. Бисикало

Представлен краткий обзор основных направлений Научной программы Национального центра физики и математики (НЦФМ). Особое внимание уделено полученным в 2023 г. результатам, их научному уровню и возможностям использования в прикладных исследованиях. Также обсуждается текущий статус создания запланированных в НЦФМ научных установок мирового уровня («миди-сайенс» и «мега-сайенс»).

SCIENTIFIC PROGRAM OF THE NATIONAL CENTER FOR PHYSICS AND MATHEMATICS

D. V. Bisikalo

National Center for Physics and Mathematics

A brief overview of the main directions of the Scientific Program of the National Center for Physics and Mathematics (NCPM) is presented. Special attention is paid to the results obtained in 2023, their scientific level and possibilities for use in applied research. The current status of the creation of world-class scientific facilities planned at the NCFM («midi-science» and «mega-science») is also discussed.

Юхимчук Аркадий Аркадьевич
ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»
Заместитель начальника отделения
607188, Россия, г. Саров Нижегородской обл.,
пр-т Мира, д. 37

Yukhimchuk Arkadiy
RFNC-VNIEF
Deputy head separation
607188, 37, Mira av., Sarov,
Nizhny Novgorod region, Russia
arkad@triton.vniief.ru



НАПРАВЛЕНИЕ «ФИЗИКА ИЗОТОПОВ ВОДОРОДА» НАЦИОНАЛЬНОГО ЦЕНТРА ФИЗИКИ И МАТЕМАТИКИ. РЕЗУЛЬТАТЫ 2023 ГОДА

А. А. Юхимчук

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

Направление № 8 «Физика изотопов водорода» Национального центра физики и математики напрямую касается тематики проводимой конференции и 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.

Основными целями проведения работ по этим Проектам является:

- получение фундаментальных и прикладных знаний в области материаловедения, развитие существующих и создание новых водородных технологий и технологий топливного цикла термоядерных устройств (хранения, разделения, очистки, транспортирования изотопов водорода);
- развитие методов и технологий уникальных исследовательских приборов для проведения исследований в области нейтринной физики и

нейтронно-избыточных ядер с использованием изотопов водорода и гелия. Получение рекордных данных по электромагнитным свойствам нейтрино и изучение свойств легких нейтронноизбыточных ядер, находящихся за границей нейтронной стабильности – фактически изучение свойств нейтронной материи.

В докладе приводятся результаты работ, выполненных в 2023 году по реализации научной программы.

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

**PROJECT «PHYSICS OF HYDROGEN ISOTOPES» OF THE
NATIONAL CENTER FOR PHYSICS AND MATHEMATICS.
RESULTS 2023**

A. A. Yukhimchuk

Russian Federal Nuclear Center – All-Russian Research Institute
of Experimental Physics

Project № 8 «Physics of hydrogen isotopes» of the National Center for Physics and Mathematics directly concerns the topics of the Conference and School. Within the framework of this project, the research is being carried out on the following projects:

- Research in the field of interaction of hydrogen isotopes with solid body;
- Fundamental research in the field of neutrino physics and neutron-excess nuclei using hydrogen and helium isotopes.

The main goals of these projects are:

- Obtaining fundamental and applied knowledge in the field of materials science, developing existing and creating new hydrogen technologies and fuel cycle technologies for thermonuclear devices (storage, separation, purification, transportation of hydrogen isotopes);

- Development of methods and technologies of unique research instruments for research in the field of neutrino physics and neutron-excess nuclei using hydrogen and helium isotopes.

The report provides the results of the work performed in 2023 on implementation of the scientific program.

The study was carried out within the framework of the scientific program of the National Center for Physics and Mathematics, project № 8 «Physics of Hydrogen Isotopes».

Кузаков Константин Алексеевич

Физический факультет МГУ
им. М. В. Ломоносова
Профессор
119991, ГСП-1, Москва, Ленинские горы,
МГУ им. М. В. Ломоносова, д. 1, стр. 2
Физический Факультет
Физика нейтрино, физика атомных
столкновений

Kouzakov Konstantin

Faculty of Physics, Lomonosov Moscow
State University
Professor
Faculty of Physics, M. V. Lomonosov Moscow
State University,
Leninskie Gory, Moscow 119991, Russia
Neutrino physics, atomic collision physics



kouzakov@gmail.com;
kouzakov@srd.sinp.msu.ru

**СТАТУС И ПЕРСПЕКТИВЫ ТРИТИЕВОГО НЕЙТРИННОГО
ЭКСПЕРИМЕНТА SATURNE**

*М. Кадедду¹, Ф. Дордеи¹, К. Джунти², А. Ивашкин³, К. Кузаков⁴,
Ф. Лазарев⁴, О. Москалев⁵, И. Степанцов⁴, А. Студеникин⁴, И. Ткачев³,
В. Трофимов⁶, М. Верховцев⁷, М. Вялков⁷, А. Юхимчук⁵, Э. Загирдинова⁴*

¹Национальный институт ядерной физики (INFN), Отделение Кальяри,
Кальяри, Италия

²Национальный институт ядерной физики (INFN), Отделение Турина,
Турин, Италия

³ИЯИ РАН, Москва, Россия

⁴МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия

⁵РФЯЦ-ВНИИЭФ, Саров, Нижегородская обл., Россия

⁶ОИЯИ, Дубна, Московская область, Россия

⁷Филиал МГУ им. М. В. Ломоносова в Сарове, Саров,
Нижегородская обл., Россия

Саровский тритиевый нейтринный эксперимент (SATURNE) гото-
вится в Национальном центре физики и математики [1]. В нем будут ис-

следоваться взаимодействия нейтрино в упругих и ионизационных нейтрино-атомных столкновениях при беспрецедентно низких энергиях, а также в нем будет вестись поиск электромагнитных свойств нейтрино [2, 3], которые являются одной из основных нерешенных проблем нейтринной физики. Отличительной особенностью SATURNE является использование высокоинтенсивного источника тритиевых нейтрино с начальной активностью не менее 10 МКи, а возможно вплоть до 40 МКи. Источник трития будет использоваться в сочетании с He-4, Si и SrI₂(Eu) мишенями для изучения упругих и ионизационных каналов столкновений нейтрино с атомами. Ожидается, что в измерениях с детектором на основе He-4 в сверхтекучем состоянии будет впервые зарегистрировано когерентное упругое рассеяние нейтрино на атоме (CEvAS) [4, 5]. Также ожидается, что после 5 лет набора данных с помощью жидкогогелиевого детектора будет достигнута рекордно высокая чувствительность к магнитному моменту нейтрино $\mu_\nu \sim 10^{-13} \mu_B$ (90 % ДИ), который среди электромагнитных свойств нейтрино является наиболее теоретически изученным и активно исследуется в экспериментах. Si и SrI₂(Eu) детекторы с рекордно низкими энергетическими порогами для соответствующих типов детектирующих систем будут измерять ионизационный канал столкновений нейтрино с атомами. Используя данные после 1 года измерений с каждым из двух детекторов, можно ожидать достижения чувствительности к μ_ν на уровне $\sim 10^{-12} \mu_B$ (90 % ДИ).

Начало набора данных в SATURNE ожидается в 2025 году, а его завершение – в 2032 году.

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

ЛИТЕРАТУРА

1. А. А. Юхимчук и др. ФИЗМАТ 1 (2023) 5.
2. C. Giunti, A. Studenikin. Rev. Mod. Phys. 87 (2015) 531.
3. A. I. Studenikin, K. A. Kouzakov. Mosc. Univ. Phys. Bull. 75 (2020) 379.
4. Yu. V. Gaponov, V. N. Tikhonov. Sov. J. Nucl. Phys. 26 (1977) 314.
5. M. Cadeddu, F. Dordei, C. Giunti, K. Kouzakov, E. Picciau, A. Studenikin. Phys. Rev. D 100 (2019) 073014.

STATUS AND PROSPECTS OF THE SATURNE TRITIUM NEUTRINO EXPERIMENT

Matteo Cadeddu¹, Francesca Dordei¹, Carlo Giunti², Alexander Ivashkin³, Konstantin Kouzakov⁴, Fedor Lazarev⁴, Oleg Moskalev⁵, Ivan Stepantsov⁴, Alexander Studenikin⁴, Igor Tkachev³, Vladimir Trofimov⁶, Maxim Verkhovtsev⁷, Maxim Vyalkov⁷, Arkady Yukhimchuk⁵, Elvira Zagirdinova⁴

¹Istituto Nazionale di Fisica Nucleare (INFN), Sezione di Cagliari, Cagliari, Italy

²Istituto Nazionale di Fisica Nucleare (INFN), Sezione di Torino, Torino, Italy

³Institute for Nuclear Research RAS, Moscow, Russia

⁴Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia

⁵Russian Federal Nuclear Center – All-Russian Scientific Research Institute of Experimental Physics, Sarov, Nizhny Novgorod region, Russia

⁶Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Moscow region, Russia

⁷Branch of Lomonosov Moscow State University in Sarov, Sarov, Nizhny Novgorod region, Russia

The Sarov tritium neutrino experiment (SATURNE) is under preparation at the National Center for Physics and Mathematics [1]. It will study neutrino interactions in elastic and ionizing neutrino-atom collisions at unprecedentedly low energies, and will also search for neutrino electromagnetic properties [2, 3], which are one of the basic unsolved problems in neutrino physics. The marked feature of SATURNE is the use of a high-intensity tritium neutrino source, with an initial activity of at least 10 MCi and possibly up to 40 MCi. The tritium source will be used in combination with the He-4, Si and SrI₂(Eu) targets in order to study the elastic and ionization channels of neutrino-atom collisions. The measurements with the liquid He-4 detector in a superfluid state are expected to provide the first observation of coherent elastic neutrino-atom scattering (CEvAS) [4, 5]. With the 5-year data using the liquid He-4 detector, it is also expected to achieve a record-high sensitivity of $\sim 10^{-13} \mu_B$ (90 % CL) to the neutrino magnetic moment μ_ν , which is the most studied theoretically and actively searched experimentally among the neutrino electromagnetic properties. The Si and SrI₂(Eu) detectors with record low-energy thresholds for such detector types will measure the ionization channel of neutrino-atom collisions. With the 1-year data from either detector, one may expect to achieve a μ_ν -sensitivity on the order of $\sim 10^{-12} \mu_B$ (90 % CL).

The first taking of data in SATURNE is expected for 2025, with the data collection expected to be completed by 2032.

The study was carried out within the framework of the scientific program of the National Center for Physics and Mathematics, project № 8 «Physics of Hydrogen Isotopes».

REFERENCES

1. A. A. Юхимчук и др. ФИЗМАТ 1 (2023) 5.
2. C. Giunti, A. Studenikin. Rev. Mod. Phys. 87 (2015) 531.
3. A. I. Studenikin, K. A. Kouzakov. Mosc. Univ. Phys. Bull. 75 (2020) 379.
4. Yu. V. Gaponov, V. N. Tikhonov. Sov. J. Nucl. Phys. 26 (1977) 314.
5. M. Cadeddu, F. Dordei, C. Giunti, K. Kouzakov, E. Picciau, A. Studenikin. Phys. Rev. D 100 (2019) 073014.

Секция 1

A4–A6, B1–B5, C1–C8

**КИНЕТИКА И ТЕРМОДИНАМИКА
ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ИЗОТОПОВ
ВОДОРОДА С ТВЕРДЫМИ ТЕЛАМИ,
ВКЛЮЧАЯ ЭФФЕКТЫ
РАДИОГЕННОГО ГЕЛИЯ**

Session 1

**KINETICS AND THERMODYNAMICS
OF THE INTERACTION OF HYDROGEN
ISOTOPES WITH SOLIDS, INCLUDING
THE EFFECTS OF RADIOGENIC HELIUM**

Заика Юрий Васильевич

Карельский научный центр РАН
Зам. генерального директора КарНЦ РАН,
директор Института прикладных математических
исследований КарНЦ РАН
185910, Республика Карелия,
г. Петрозаводск, ул. Пушкинская, 11,
КарНЦ РАН

Обратные задачи математической физики,
моделирование взаимодействия изотопов
водорода с конструкционными материалами

Zaika Yuriy

Karelian Research Centre RAS
Deputy Director General for Research
Administration, Director of the Institute of Applied
Math Research
11 Pushkinskaya St., Petrozavodsk, 185910, Karelia
Inverse problems of mathematical physics, modelling
of hydrogen interaction with structural materials

zaika@krc.karelia.ru

**ГИБРИДНАЯ МОДЕЛЬ ТЕРМОДЕСОРБЦИИ ВОДОРОДА
ИЗ КОНСТРУКЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ**

Ю. В. Заика

Институт прикладных математических исследований КарНЦ РАН

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 гибридную модель ТДС, сочетающую в себе модель в терминах усредненной по объему концентрации с более детализированной моделью в форме уравнения диффузии с динамическими граничными условиями, отражающими процессы на поверхности. В итоге приходим к системе обыкновенных дифференциальных уравнений (системе ОДУ относительно невысокого порядка). Такая модель не требует разработки специализированного программного обеспечения. Можно в любом математическом пакете (например, в свободно распространяемом Scilab, язык программирования которого практически совпадает с Matlab) без существенных затрат машинного времени численно моделировать различные ситуации и условия эксплуатации материала. Помимо модели представлены результаты численного моделирования.

HYBRID MODEL OF HYDROGEN THERMAL DESORPTION FROM STRUCTURAL MATERIALS

Yu. V. Zaika

Institute of Applied Math Research of Karelian Research Centre RAS

One of the effective experimental methods for studying the interaction of structural materials with hydrogen isotopes is thermal desorption spectrometry (TDS). A sample (we are considering a thin plate of a material with metallic properties), previously saturated with dissolved atomic hydrogen, is heated relatively slowly in a vacuum chamber. The degassing flux is recorded using a mass spectrometer. Quite often, several local peaks are recorded in the spec-

trum (dependence of the desorption flux density from a two-sided surface on the current temperature). Traditionally, this is associated with reversible capture in various types of traps (inhomogeneities of the material) with different binding energies. But numerical experiments on diffusion models with nonlinear dynamic boundary conditions describing the dynamics of surface concentrations show the possibility of another scenario. Schematically: first, hydrogen leaves the surface and the near-surface volume (first peak). A large concentration gradient is formed near the surface. For this reason, and with further heating, diffusion pumping from the volume is significantly activated, which leads to a subsequent burst of desorption. The work analyzes various thermal desorption models and provides recommendations on how to distinguish degassing scenarios corresponding to these significantly different physicochemical reasons.

The main goal of the report is to present a hybrid model of TDS, combining a model in terms of volume-averaged concentration with a more detailed model in the form of a diffusion equation with dynamic boundary conditions reflecting surface processes. As a result, we arrive at a system of ordinary differential equations (a system of ODEs of relatively low order). This model does not require the development of specialized software. It is possible in any math package (for example, in the freeware Scilab, the programming language of which is almost the same as Matlab) to numerically simulate various situations and operating conditions of the material without significant expenditure of computer time. In addition to the model, the results of simulation are presented.

Крат Степан Андреевич

НИЯУ МИФИ

Старший научный сотрудник

Москва, Каширское шоссе, 31

Накопление изотопов водорода

в осажденных из плазмы металлических слоях

Krat Stepan

NRNU MEPHI

Senior researcher

Moscow, Kashirskoe shosse 31

Hydrogen isotope accumulation in metal

layers codeposited from plasma

sakrat@mephi.ru



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

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

Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ

Накопление радиоактивного изотопа водорода трития в термоядерных установках представляется одним из серьезных 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 обращенных к плазме элементов первой стенки реактора и частиц плазмы (изотопов водорода, гелия и т. д.). В результате со-осаждения происходит рост насыщенных водородом слоев (пленок). В отличие от процесса накопления за счет имплантации в поверхность, который после достижения определенной дозы облучения выходит на насыщение, сопровождающееся резким замедлением скорости дальнейшего накопления, накопление за счет со-осаждения может происходить практически неограниченно, порождая слои, насыщенные водородом на всю глубину. Так, для токамака JET с бериллий-вольфрамовой «ИТЭР-подобной» стен-

кой, показано, что на долю со-осаждения в виде толстых слоев приходится ~50 % всего накопления тяжелых изотопов водорода в установке [2]. Содержание водорода даже в не образующих гидриды металлах, таких как вольфрам, может превышать 10 ат.%, [3], а в гидридообразующих металлах, таких как Be, достигать 60 ат.%. [4]. Толстые со-осажденные пленки 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 [5], не говоря о различных токамаках, стеллараторах и линейных установках. Свойства со-осажденного слоя, его микроструктура может очень сильно различаться 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.

Для предсказания содержания водорода в со-осажденном слое в зависимости от условий осаждения широко применяется эмпирическое уравнение масштабирования, впервые разработанное Г. Де Теммерманом [4], которое в дальнейшем было развито В. Алимовым [3] и А. Залозником [6]. Также существует теоретически обоснованная формула, основанная на решении уравнения диффузии-адвекции с ловушками [7], верифицированная для вольфрама, молибдена, алюминия [8]. Вместе с тем, остается открытым ряд вопросов, таких как влияние энергии имплантации водорода, фонового давления и изотопного состава водорода на свойства со-осажденного слоя и содержание водорода в нем. В свете изменения базового сценария ИТЭР особо стоит отметить то, что на текущий момент в открытом доступе нет работ по со-осаждению водорода с бором, а немногочисленные работы по получению бор-водородных покрытий из прекурсоров показывают содержание водорода до ~80 ат.% [9].

В качестве основного способа детритизации со-осажденных слоев предполагается их нагрев в вакууме. Возможным решением также является изотопный обмен с противем, показавший высокую эффективность (до ~99 %) уже при низких (до 200 С) температурах [10, 11].

CO-DEPOSITION AS HYDROGEN ACCUMULATION CHANNEL IN TOKAMAKS: DANGER, PHYSICS, SOLUTIONS

*S. A. Krat, A. S. Prishvitsyn, E. A. Fefelova, Ya. A. Vasina, A. S. Popkov,
Yu. M. Gasparyan, A. A. Pisarev*

National Research Nuclear University MEPhI

The accumulation of the radioactive hydrogen isotope tritium in fusion devices is one of the main challenges to realizing commercially viable controlled fusion. For example, international fusion reactor ITER is limited by regulation to only 700 g. of tritium in the device at any time [1].

Co-deposition is the process of simultaneous deposition of erosion products of plasma-facing elements of the first reactor wall and plasma particles (isotopes of hydrogen, helium, etc.). As a result of co-deposition, hydrogen-saturated layers (films) grow. Unlike the accumulation process due to implantation into the surface, which, after reaching a certain fluence, reaches saturation, accompanied by a sharp slowdown in the rate of further accumulation, hydrogen accumulation due to co-deposition can occur almost infinitely, generating layers saturated with hydrogen through their entire depth. For example, for JET tokamak with a beryllium-tungsten «ITER-like» wall, it was shown that co-deposition in the form of thick layers accounts for ~50 % of the total accumulation of heavy hydrogen isotopes in the installation [2]. The hydrogen content even in non-hydride-forming metals such as tungsten can exceed 10 at.%, [3] and in hydride-forming metals such as Be, reach ~60 at.%. [4]. Thick co-deposited films can peel off from the surface, forming dust, which also poses a danger to the operation of fusion plants.

The range of deposition parameters, such as surface temperature, fluxes and energies of hydrogen and erosion products, the presence of helium impurities and the isotopic composition of hydrogen is very wide even within a single tokamak [5] not to mention distinct tokamaks, stellarators and linear installations. The properties of the co-deposited layer and its microstructure can vary greatly depending on the deposition conditions, making the development of any models and prediction of the hydrogen content in the layer much more difficult tasks than they are for implanting hydrogen into an already existing surface.

The empirical scaling equation, first developed by G. De Temmerman [3], which was later improved by V. Alimov [3] and A. Zaloznik [6], is widely used to predict the hydrogen content in the co-deposited layer depending on the deposition conditions. There is also a theory based formula using the diffusion-

advection equation with traps [7], verified for tungsten, molybdenum, and aluminum [8]. At the same time, a number of questions remain open, such as the effect of hydrogen implantation energy, background pressure and isotopic composition of hydrogen on the properties of the co-deposited layer and the hydrogen content in it. In light of the change in the basic ITER scenario, it is particularly worth noting that currently there are no available papers on the co-deposition of hydrogen with boron, and few works on the production of boron-hydrogen coatings from precursors show a hydrogen content of up to ~80 at.% [9].

The main detritization method considered is vacuum annealing. Isotope exchange with protium is also a possible solution, with demonstrated high efficiency up to ~99 % at relatively low (up to 200 C) temperatures [10, 11].

REFERENCES

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. Widdowson A. et al. Evaluation of tritium retention in plasma facing components during JET tritium operations // *Phys. Scr.* 2021. Vol. 96, № 12. P. 124075.
3. 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.
4. 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.
5. 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.
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. Gasparyan Y. et al. Temperature dependence of hydrogen co-deposition with metals // *Fusion Eng. Des.* National Research Nuclear University MEPhI, (Moscow Engineering Physics Institute), Kashirskoe shosse 31, Moscow, 115409, Russian Federation, (Moscow Engineering Physics Institute),

Kashirskoe shosse 31, Moscow, 115409, Russian Federation: Elsevier Ltd, 2019. Vol. 146. P. 1043–1046.

9. Yamage M. et al. Wall Temperature Dependence of Boronization Using Decaborane and Diborane // *Jpn. J. Appl. Phys.* 1993. Vol. 32, № 9R. P. 3968.

10. 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.

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

Мусяев Рафаэль Камилевич
ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»
Ведущий научный сотрудник
607190, Россия, г. Саров, пр-т Мира, д. 37
Тритиевые технологии, гидриды металлов,
физика плазмы, изотопы водорода

Musyaev Rafael
Russian Federal Nuclear Center – All-Russian
Research Institute of Experimental Physics
(RFNC-VNIIEF)
Leading Researcher
Sarov, Nizhny Novgorod region, RU-607190
Tritium technology, hydride of metals,
plasma physic, hydrogen isotopes

RKMusyaev@vniief.ru



ВОДОРОДОПРОНИЦАЕМОСТЬ МЕМБРАННЫХ ОБРАЗЦОВ СПЛАВА ВТ6, ПОЛУЧЕННЫХ АДДИТИВНЫМ ПЛС-МЕТОДОМ

Р. К. Мусяев, А. В. Вертей, И. Л. Малков, А. В. Бучирин

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

Приведены результаты расчета параметров водородопроницаемости образцов сплава ВТ6, полученных аддитивным методом послойного лазерного спекания (ПЛС). Рассмотрено влияние геометрии конструкции модельной сборки с мембранным образцом на характер экспериментальной кривой проницаемости, а также зависимость диффузии от давления водорода на входной стороне мембранного образца.

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

HYDROGEN PERMEABILITY OF MEMBRANE SAMPLES OF BT6 ALLOY, OBTAINED BY ADDITIVE METHOD OF SELECTIVE LASER MELTING

R. K. Musyaev, A. V. Vervey, I. L. Malkov, A. V. Buchirin

Results of calculation of hydrogen permeability parameters of BT6 alloy samples obtained by additive method of layer-by-layer laser melting are presented in the paper. The influence of the geometry of the model assembly with the membrane sample on the nature of experimental permeability curve, as well as the dependence of the diffusion on the hydrogen pressure at the input side of the membrane sample are considered.

The study was carried out within the framework of the scientific program of the National Center for Physics and Mathematics, project № 8 «Physics of Hydrogen Isotopes».

Трифонов Сергей Александрович

АО «Радиевый институт им. В. Г. Хлопина»

Руководитель проекта
194021, Санкт-Петербург,
2-й Муринский пр., д. 28www.khlopin.ruУскорительная техника, нанотехнология,
радиационное материаловедение, радиохимия**Trifonov Sergei**JSC «Radium Institute named
after. V. G. Khlopin»

Project Manager

194021, St. Petersburg, 2nd Murinsky Ave., 28
www.khlopin.ruAccelerator technology, nanotechnology,
radiation materials science, radiochemistry

triser89@gmail.com

**ЦЕНТР ЦИКЛОТРОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ НА БАЗЕ
АО «РАДИЕВЫЙ ИНСТИТУТ ИМ. В. Г. ХЛОПИНА»:
ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ И ПРИКЛАДНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ***С. А. Трифонов, И. Е. Алексеев, А. В. Ванин, В. А. Калинин, С. А. Родионов*

АО «Радиевый институт им. В. Г. Хлопина»

В настоящее время ГК «Росатом» принято решение о создании Центра циклотронных технологий на базе АО «Радиевый институт им. В. Г. Хлопина». Ядром центра станет экспериментальный комплекс на базе компактного изохронного циклотрона СС-30/15 производства АО «НИИЭФА». Циклотронный комплекс СС-30/15 является электрофизической стационарной установкой, предназначенной для коммерческой наработки радионуклидов и проведения перспективных исследований в области ядерной медицины, ядерной физики и радиационного материаловедения. Циклотронный комплекс состоит из циклотрона, мишенного комплекса, системы транспортировки пучка и обеспечивающих систем. Центр циклотронных технологий также будет включать в себя технологические участки подготовки мишеней, выделения целевых радионуклидов,

контроля качества и лабораторию ядерно-физических исследований. Циклотрон СС-30/15 реализует ускорение отрицательных ионов водорода и дейтерия до энергий в диапазонах 15–30 и 8–15 МэВ соответственно с высокой эффективностью вывода ускоренных пучков путем перезарядки в протоны и дейтроны. Гарантированный ток пучка – до 350 мкА для протонов и до 150 мкА для дейтронов.

В ЦЦТ планируются следующие научные направления:

1. Производство диагностических и терапевтических медицинских радионуклидов для специализированных клиник Санкт-Петербурга, Москвы, Московской области, Северо-Западного региона РФ.

2. Производство коммерческих радионуклидов для их реализации на отечественном и мировом рынках изотопов.

3. Ядерно-физические исследования, такие, как: измерение функций возбуждения и сечений ядерных реакций; исследование каналов ядерных реакций, образование возбужденных/изомерных состояний ядер, измерение угловых распределений вторичного излучения; исследование ядерных реакций с нейтронами, получаемых в $2\text{H}(d,n)$, $3\text{H}(d,n)$, $7\text{Li}(p,n)$, $9\text{Be}(p,n)$ и $9\text{Be}(d,n)$ реакциях; активационный анализ материалов с использованием пучков протонов, дейтронов и нейтронов; исследование состава и распределения составляющих материалов методом обратного рассеяния.

4. Материаловедческие исследования: конструкционных материалов атомной энергетики (в том числе, высокоэнтропийных сплавов), мишеней для получения циклотронных радионуклидов, матриц для хранения и захоронения радиоактивных отходов.

5. Проведение совместных исследований в области ядерной физики, радиохимии и радиационного материаловедения со сторонними организациями.

На текущий момент в Российской Федерации отсутствуют современные центры ядерных технологий, способных обеспечить ширококомасштабное производство короткоживущих и долгоживущих радионуклидов, а также проведение указанных научных направлений. Единственный циклотрон, пригодный для вышеуказанных целей, РИЦ-30 (г. Тверь), разработан в АО «НИИЭФА» в 80-х годах и, в настоящий момент, обладает ограниченными возможностями (энергия протонов 30 МэВ нерегулируемая, ускорение дейтронов не предусмотрено).

**CENTER FOR CYCLOTRON TECHNOLOGIES BASED ON JSC
«RADIUM INSTITUTE NAMED AFTER. V. G. KHLOPIN»:
FUNDAMENTAL AND APPLIED RESEARCH**

S. A. Trifonov, I. E. Alekseev, A. V. Vanin, V. A. Kalinin, S. A. Rodionov

JSC «Radium Institute named after. V. G. Khlopin»

Currently, Rosatom State Corporation has decided to create a Center for Cyclotron Technologies on the basis of JSC «Radium Institute named after V. G. Khlopin». The core of the center will be an experimental complex based on the compact isochronous cyclotron SS-30/15 produced by JSC NIEFA. The technical characteristics of the complex and comparison with foreign and domestic cyclotrons with a proton beam energy of 30 MeV are shown. The promising program of applied and fundamental research of the Center for Cyclotron Technologies, as well as the production capabilities of the center are presented.

Кульсартов Тимур Валиханович
ТОО «Институт прикладных наук
и информационных технологий»,
Казахстан, г. Алматы
Институт ядерной физики, г. Алматы,
Казахстан

Kulsartov Timur
tima@physics.kz



ОСОБЕННОСТИ ЭКСПЕРИМЕНТОВ ПО ИССЛЕДОВАНИЮ НАРАБОТКИ И ВЫДЕЛЕНИЯ ТРИТИЯ ИЗ ЛИТИЙСОДЕРЖАЩИХ КЕРАМИК НА РЕАКТОРЕ ВВРК

*Т. В. Кульсартов¹, Е. В. Чихрай¹, С. К. Аскербеков^{1,2}, А. Шаймерденов^{1,2},
Ж. Заурбекова¹, И. Кенжина¹*

¹ТОО «Институт прикладных наук и информационных технологий»,
г. Алматы, Казахстан

²Институт ядерной физики, г. Алматы, Казахстан

Конструкция будущих термоядерных реакторов предполагает производство трития внутри blankets-размножителя. Одними из перспективных материалов для blankets-размножителя на сегодняшний день являются литиевые керамики. Тритий образуется в литии под нейтронным облучением по реакции ${}^6\text{Li}(n,\alpha)\text{T}$. Далее этот тритий извлекается из blankets продувочным газом и возвращается в зону синтеза, реализуя концепцию замкнутого термоядерного цикла.

Облучение в условиях реактора деления до сих пор остается одним из немногих доступных методов оценки параметров генерации и выделения трития из литийсодержащих материалов в режиме in-situ. В данной работе представлено описание типового реакторного эксперимента по нейтронному облучению литиевых керамик на реакторе ВВР-К, включая экспе-

риментальную установку, реакторное ампульное устройство, методику проведенных измерений для различных режимов эксперимента и пр.

В рассмотрении реакторный эксперимент разбит на несколько областей: области где варьируется мощность реактора на начальном и конечном этапе кампании реактора, области где варьируется мощность в процессе кампании реактора, области где изменяется температура образцов внешним нагревателем, области где проводится напуск газов (водород, дейтерий, пары воды) в камеру установки с образцами.

В работе представлены особенности методики и получаемых данных о зависимостях выделения тритийсодержащих молекул и гелия для каждого этапа облучательного эксперимента. На основе анализа результатов реакторных экспериментов предложены механизмы выделения трития и гелия из литиевых керамик в условиях реакторного облучения.

FEATURES OF EXPERIMENTS TO STUDY THE PRODUCTION AND RELEASE OF TRITIUM FROM LITHIUM-CONTAINING CERAMICS AT THE WWR-K REACTOR

*T. V. Kulsartov¹, Ye. V. Chikhray¹, S. K. Askerbekov^{1,2},
A. A. Shaimerdenov^{1,2}, Zh. A. Zaurbekova¹, I. Ye. Kenzhina¹*

¹Institute of Applied Sciences and Information Technologies LLP,
Almaty, Kazakhstan

²Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan

The design of future fusion reactors involves the production of tritium inside the breeder blanket. One of the most promising materials for breeder blankets today are lithium ceramics. Tritium is formed in lithium under neutron irradiation by the reaction ${}^6\text{Li}(n,\alpha)\text{T}$. This tritium is then removed from the blanket by a purge gas and returned to the fusion zone, implementing the concept of a closed thermonuclear cycle.

Irradiation under fission reactor conditions is still one of the few available methods for assessing the parameters of generation and release of tritium from lithium-containing materials in in-situ mode. This report presents a description of a typical reactor experiment on neutron irradiation of lithium ceramics at the WWR-K reactor (Almaty, Kazakhstan), including the experimental setup, reactor ampoule device, measurement techniques for various experimental modes, etc.

In consideration, the reactor experiment is divided into several areas: areas where the power varies at the initial and final stages of the reactor campaign, areas where the power varies during the reactor campaign, areas where the temperature of the samples changes with an external heater and areas where gases are injected (hydrogen, deuterium, water vapor) into the experimental chamber with samples.

The report presents the features of the methodology and the obtained data on the dependences of the release of tritium-containing molecules and helium for each stage of the irradiation experiment. Based on an analysis of the results of reactor experiments, mechanisms for the release of tritium and helium from lithium ceramics under reactor irradiation conditions are proposed.

Елишенков Александр Борисович

ТОО «Институт прикладных наук
и информационных технологий»,
Казахстан, г. Алматы

АО «Ульбинский металлургический завод»,
г. Усть-Каменогорск, Казахстан

Yelishenkov Alexandr

e-mail: aleksandrelishenkov282@gmail.com



ЭКСПЕРИМЕНТЫ ПО ИССЛЕДОВАНИЮ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ВОДОРОДА С БЕРИЛЛИДОМ НИОБИЯ Be_2Nb_3

*А. Б. Елишенков¹, Е. В. Чихрай¹, Т. В. Кульсартов¹, И. Е. Кенжина¹,
Ж. А. Заурбекова¹, С. К. Аскербек¹, Е. А. Кенжин¹, С. В. Ударцев²*

¹ТОО «Институт прикладных наук и информационных технологий»,
г. Алматы, Казахстан

²АО «Ульбинский металлургический завод», г. Усть-Каменогорск,
Казахстан

Интерес к интерметаллидным соединениям бериллия связан с широким спектром возможностей их применения в энергетике от конструкционных материалов в ядерных и термоядерных реакторах до систем хранения водорода.

Бериллид ниобия обладая хорошей теплопроводностью и стойкостью к высоким температурам, высокой механической прочностью, низким коэффициентом захвата нейтронов, может использоваться для изготовления различных деталей теплообменных поверхностей, оболочки топливных элементов, и т. п. в термоядерных и ядерных реакторах.

Способность интерметаллидов образовывать гидриды открывает возможность для использования в качестве накопителей водорода для водородной энергетики. Традиционные способы хранения водорода в сжатом или сжиженном виде имеют ряд недостатков: высокие энергоза-

траты, сложности изготовления и безопасной эксплуатации баллонов высокого давления и т. д. Альтернативным способом является использование гидридов металлов отвечающих основным требованиям, таким как - обеспечение приемлемых температур высвобождения и поглощения, сохранение фазового состояния в нужном диапазоне температур и давлений, обеспечение высокой объемной и массовой плотности по водороду, быть перезаряжаемыми.

Для определения спектра и возможности применения для решения этих задач важно понимать параметры и механизм взаимодействия Be_2Nb_3 с водородом, что достигается проведением экспериментальных и теоретических исследований.

А представленной работе проведены исследования сорбционно-десорбционных свойств бериллида ниобия Be_2Nb_3 . Особый интерес данного исследования представляет наличие в Казахстане действующего промышленного производства, выпускающее бериллий содержащие материалы: АО «Ульбинский металлургический завод».

Для проведения исследований по взаимодействию водорода с бериллидом ниобия разработана методика и изготовлена установка по проведению сорбционно-десорбционных экспериментов (методом Сивертса), имитирующая условия работы перспективных материалов в реальных условиях. Для проведения экспериментов установка оснащена: системой автоматической регистрации данных, с возможностью удаленного мониторинга, получения данных для обработки и управления в режиме реального времени через Интернет, системой контроля аварийных ситуаций с возможностью удаленного управления отключения установки, а также автономная работа при отключении энергоснабжения. Установка позволяет проводить исследования с малоразмерными образцы (малого размера, массы и объема) что повышает чувствительность метода, в диапазонах давлений от нескольких Торр до сотен атмосфер, при нагреве до 700 °С, реализовать программы с различными температурными профилями (линейные нагрев, охлаждение, выдержка на температурных полках).

Исследования проводились с компактированными образцами, полученными спеканием в вакуумной печи, предварительно уплотненной путем прессования смеси исходных порошков бериллия, взятых в стехиометрической пропорции, соответствующей соединению Be_2Nb_3 . Плотность компактированного образца составила не менее 70 % от теоретического значения, часть материала была подвергнута измельчению для получения порошка.

При проведении экспериментов велась постоянная регистрация следующих параметров: температура образца, давление в камере с образцами (с поправкой на изменение средней температуры газовой смеси при нагреве установки). В результате исследований были получены зависимости поглощения и выделения водорода из образцов в диапазоне давлений от 1 до 8 МПа и температур от 25 до 550 °С. По полученным зависимостям были определены следующие параметры - количество водорода в образцах, построены температурные зависимости и константы растворимости.

В представленной работе приводятся схема установки, описание систем, параметры экспериментов и результаты проведенных исследований по взаимодействию водорода с бериллидом ниобия Be_2Nb_3 .

EXPERIMENTS TO STUDY THE INTERACTION OF HYDROGEN WITH NIOBIUM BERYLLIDE Be_2Nb_3

A. B. Yelishenkov¹, Ye. V. Chikhray¹, T. V. Kulsartov¹, I. Ye. Kenzhina¹, Zh. A. Zaurbekova¹, S. K. Askerbekov¹, Ye. A. Kenzhin¹, S. V. Udartsev²

¹Institute of Applied Sciences and Information Technologies LLP, Almaty, Kazakhstan

²JSC «Ulba Metallurgical Plant», Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan

Interest in beryllium intermetallic compounds is associated with a wide range of possibilities for their application: in the energy sector, from structural materials in fission and fusion reactors to hydrogen storage systems.

Niobium beryllide, having good thermal conductivity and resistance to high temperatures, high mechanical strength and low neutron capture coefficient, can be used for the manufacture of various parts of heat exchange surfaces, fuel cell shells, etc. in fusion and fission reactors.

The ability of intermetallic compounds to form hydrides opens up the possibility of being used as hydrogen storage devices for hydrogen energy. Traditional methods of storing hydrogen in compressed or liquefied form have a number of disadvantages: high energy costs, difficulties in manufacturing and safe operation of high-pressure cylinders, etc. An alternative method is to use metal hydrides that meet basic requirements, such as ensuring acceptable release and absorption temperatures, maintaining the phase state in the required

temperature and pressure range, ensuring high volumetric and mass density of hydrogen, and being rechargeable.

To determine the spectrum and possibilities of using Be_2Nb_3 to solve these problems, it is important to understand the parameters and mechanism of its interaction with hydrogen, which is achieved by conducting experimental and theoretical studies.

In the presented work, studies of the sorption-desorption properties of niobium beryllide Be_2Nb_3 were carried out.

The presence in Kazakhstan of an existing production facility producing beryllium-containing materials – Ulba Metallurgical Plant JSC is of particular interest to this study.

To conduct research on the interaction of hydrogen with niobium beryllide, a methodology has been developed and a facility has been manufactured for conducting sorption-desorption experiments (using the Sieverts' method), simulating the operation of promising materials under real conditions. To conduct experiments, the facility is equipped with an automatic data recording system, with the ability to remotely monitor, obtain data for processing and control in real time via the Internet, an emergency monitoring system with the ability to remotely control the facility shutdown, as well as autonomous operation during a power outage.

The facility allows for research with small samples (small size, mass and volume), which increases the sensitivity of the method, in pressure ranges from several Torr to hundreds of atmospheres, when heated to 700 °C, implementing programs with different temperature profiles (linear heating, cooling, aging on temperature shelves).

The studies were carried out with compacted samples obtained by sintering in a vacuum furnace, pre-compacted by pressing a mixture of initial beryllium powders, taken in a stoichiometric proportion corresponding to the Be_2Nb_3 compound.

The density of the compacted sample was no less than 70% of the theoretical value; part of the material was crushed to obtain powder.

During the experiments, the temperature of the sample and the pressure in the chamber with the samples were constantly recorded (adjusted for changes in the average temperature of the gas mixture when the facility was heated). As a result of the research, the dependences of the absorption and release of hydrogen from samples in the pressure range from 1 to 8 MPa and temperatures from 25 to 550 °C were obtained. Based on the obtained dependences, the amount of hydrogen in the samples was determined, temperature dependences and solubility constants of hydrogen in Be_2Nb_3 were plotted.

Маклашова Ирина Владимировна

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

Начальник отдела

115409, Москва, Каширское шоссе, 31

Моделирование свойств веществ в широком диапазоне температур и давлений, включая сверхкритические области

Maklashova Irina Vladimirovna

National Research Nuclear University MEPHI

(Moscow Engineering Physics Institute)

Head of the Department

Kashirskoye Highway, 31, Moscow, 115409

Modeling of the properties of substances in a wide range of temperatures and pressures, including supercritical regions

ivmaklashova@mephi.ru

**РАЗРАБОТКА УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ ИЗОТОПОВ ВОДОРОДА И ИХ СМЕСЕЙ С ГЕЛИЕМ МЕТОДАМИ ТЕРМОДИНАМИКИ И МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ**

Ю. А. Богданова¹, И. В. Маклашова¹, А. Ю. Алейников², А. А. Селезнев^{1,2},
В. Ю. Королев²

¹Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

²Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики

Для расчета теплофизических характеристик и уравнения состояния газовых смесей разработаны численные методики на основе термодинамического и молекулярно-динамического (МД) моделирования с использованием различных потенциалов межатомного и межмолекулярного взаимодействия, а также на основе *ab initio* подхода. Данные методики позволяют рассчитывать теплофизические характеристики газовых смесей и параметры уравнения состояния в широком диапазоне давления и температуры с точностью, сопоставимой с точностью экспериментального определения рассматриваемых параметров.

Для расчетов методами *ab initio* МД была проведена работа по объединению расчетных возможностей пакетов Quantum ESPRESSO (QE) [1] и LAMMPS [2] с помощью интерфейса MDI [3] (комплекс программ LampGraph). MDI (MolSSI Driver Interface) предоставляет стандартизированный API для быстрой оперативной связи между кодами вычислительной химии. Это значительно упрощает задействование возможностей нескольких программных пакетов в рамках одной задачи. Обмен данными между кодами осуществляется с помощью библиотеки MDI, которая обеспечивает тесную связь между кодами с использованием методов MPI или TCP/IP. В рамках проведенных работ написан драйвер на языке FORTRAN90, работающий на стороне QE, который, в свою очередь, используя возможности реализации MDI на стороне LAMMPS осуществляет обмен данными между QE и LAMMPS. Таким образом, удалось объединить в одной задаче проведения *ab initio* МД моделирования возможности двух расчетных кодов, написанных на разных языках программирования: C++ (LAMMPS) и FORTRAN90 (QE). На каждом шаге *ab initio* МД моделирования вычисление «холодной» составляющей энергии, сил и вириала осуществлялось на стороне QE, а добавление «кинетической» составляющей энергии с последующим интегрированием уравнений движения, а также термостатированием и баростатированием осуществлялось на стороне пакета LAMMPS.

Авторы работы благодарят С. Н. Ганчука за помощь в разработке комплекса программ LampGraph и проведении расчетов.

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. <https://github.com/QEF/q-e>.
2. <https://github.com/lammps>.
3. https://molssi-mdi.github.io/MDI_Library.

DEVELOPMENT OF THE EQUATION OF STATE OF HYDROGEN ISOTOPES AND THEIR MIXTURES WITH HELIUM BY METHODS OF THERMODYNAMICS AND MOLECULAR DYNAMICS

*I. V. Maklashova¹, Yu. A. Bogdanova¹, A. Yu. Aleynikov¹, A. A. Selezenev^{1,2},
V. Yu. Korolev²*

¹National Research Nuclear University MEPH
(Moscow Engineering Physics Institute)

²Russian Federal Nuclear Center – All-Russian Research Institute
of Experimental Physics

To calculate the thermophysical characteristics and the equation of state of gas mixtures, numerical methods have been developed based on thermodynamic and molecular dynamics modeling using various potentials of interatomic and intermolecular interaction, as well as based on the ab initio approach. These techniques make it possible to calculate the thermophysical characteristics of gas mixtures and the parameters of the equation of state in a wide range of pressure and temperature with an accuracy comparable to the accuracy of the experimental determination of the parameters under consideration.

For calculations using ab initio MD methods, work was carried out to combine the calculation capabilities of the Quantum ESPRESSO (QE) [1] and LAMMPS [2] packages using the MDI interface [3] (LampGraph software package). MDI (MolSSI Driver Interface) provides a standardized API for fast, on-the-fly communication between computational chemistry codes. This greatly simplifies the use of the capabilities of several software packages within one task. Data exchange between codes is carried out using the MDI library, which provides tight communication between codes using MPI or TCP/IP methods. As part of the work carried out, a driver was written in FORTRAN90, running on the QE side, which, in turn, using the capabilities of MDI implementation on the LAMMPS side, exchanges data between QE and LAMMPS. Thus, it was possible to combine in one task of ab initio MD modeling the capabilities of two calculation codes written in different programming languages: C++ (LAMMPS) and FORTRAN90 (QE). At each ab initio MD simulation step, the calculation of the «cold» component of energy, forces and virial was carried out on the QE side, and the addition of the «kinetic» energy component with subsequent integration of the equations of motion, as well as thermostatting and pressure control was carried out on the LAMMPS package side.

The authors of the work thank S. N. Ganchuk for assistance in developing the LampGraph software package and performing calculations.

The work was carried out within the framework of the scientific program of the National Center of Physics and Mathematics (project 8 «Hydrogen Isotope Physics», direction 8.1 «Research in the field of interaction of hydrogen isotopes with solids»).

REFERENCES

1. <https://github.com/QEF/q-e>.
2. <https://github.com/lammps>.
3. https://molssi-mdi.github.io/MDI_Library.

Богданова Юлия Андреевна

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

Доцент

115409, Москва, Каширское шоссе, 31

Моделирование свойств веществ в широком диапазоне температур и давлений, включая сверхкритические области

Bogdanova Yulia Andreevna

National Research Nuclear University MEPHI
(Moscow Engineering Physics Institute)

Assistant professor

Kashirskoye Highway, 31, Moscow, 115409

Modeling of the properties of substances in a wide range of temperatures and pressures, including supercritical regions

yabogdanova@mephi.ru

**МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ДИФФУЗИИ ВОДОРОДА В МЕТАЛЛАХ**

Ю. А. Богданова, И. В. Маклашова, А. А. Сураева

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

В последнее время активно проводятся исследования диффузии водорода в металлах. Это связано с тем, что система «водород-металл» широко применяется в промышленных технологиях, в которых становится важно оценить негативное влияние водорода на свойства материалов, с которыми он взаимодействует, например, их охрупчивание или коррозия. Водород вследствие малых массы и размеров по сравнению с другими атомами газов и металлов обладает чрезвычайно высокой диффузионной подвижностью, которая также может быть связанной с квантовой природой водорода. Существующие экспериментальные работы требуют системного анализа и дополнения теоретическими оценками для описания коэффициентов диффузии с учетом различных эффектов в широком диапазоне температур и давлений.

Моделирование диффузии водорода в металлах с гранецентрированной кубической решеткой на примере алюминия и никеля было проведено на основе междоузельного механизма – динамики миграции (перемещения) атома водорода из одного положения в другое без его локализации в узлах кристаллической решетки в программном пакете LAMMPS [1] с использованием потенциала модели погруженного атома.

Для определения коэффициента диффузии водорода использовался расчет среднеквадратичного смещения атомов водорода в среде. Полученные данные изменения коэффициента диффузии водорода в зависимости от изменения температуры и давления в никеле и алюминии согласуются с имеющимися литературными данными.

Зависимость коэффициента диффузии от концентрации водорода требует дальнейшего изучения.

Также представляет интерес выявление влияния дефектов в кристаллической решетке металлов на диффузию водорода.

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. <https://github.com/lammps>.

MOLECULAR DYNAMICS MODELING OF HYDROGEN DIFFUSION IN METALS

I. V. Maklashova, Yu. A. Bogdanova, A. A. Suraeva

National Research Nuclear University MEPHI
(Moscow Engineering Physics Institute)

Recently, active research has been carried out on the diffusion of hydrogen in metals. This is due to the fact that the hydrogen-metal system is widely used in industrial technologies, in which it becomes important to evaluate the negative impact of hydrogen on the properties of materials with which it interacts, for example, their embrittlement or corrosion. Hydrogen, due to its small mass

and size compared to other atoms of gases and metals, has extremely high diffusion mobility, which may also be associated with the quantum nature of hydrogen. Existing experimental work requires system analysis and complementation with theoretical estimates to describe diffusion coefficients taking into account various effects in a wide range of temperatures and pressures.

Modeling of hydrogen diffusion in metals with a face-centered cubic lattice using the example of aluminum and nickel was carried out on the basis of the interstitial mechanism - the dynamics of migration (movement) of a hydrogen atom from one position to another without its localization at the sites of the crystal lattice in the LAMMPS software package [1] using the potential embedded atom models.

To determine the diffusion coefficient of hydrogen, we used the calculation of the root-mean-square displacement of hydrogen atoms in the medium. The obtained data on changes in the diffusion coefficient of hydrogen in nickel and aluminum depending on temperature and pressure are consistent with the available literature data.

The dependence of the diffusion coefficient on hydrogen concentration requires further study.

It is also of interest to identify the influence of defects in the crystal lattice of metals on the diffusion of hydrogen.

The work was carried out within the framework of the scientific program of the National Center of Physics and Mathematics (project 8 «Hydrogen Isotope Physics», direction 8.1 «Research in the field of interaction of hydrogen isotopes with solids»).

REFERENCES

1. <https://github.com/lammps>.

Персианова Анастасия Павловна

НИЦ «Курчатовский институт»

Лаборант-исследователь

123182, Россия, Москва,

пл. Академика Курчатова, 1

Изотопы водорода, обращенные к плазме
материалы

Persianova Anastasia

NRC Kurchatov Institute

Research assistant

123182, Russia, Moscow, Ac. Kurchatov sq., 1

Hydrogen isotopes, plasma-facing materials

Persianova_AP@nrcki.ru



МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАХВАТА ДЕЙТЕРИЯ В СТАЛИ ЭК-181

А. П. Персианова¹, А. В. Голубева¹, В.С. Ефимов²

¹НИЦ «Курчатовский институт», Москва

²НИЯУ МИФИ, Москва

В ходе работы термоядерных реакторов и термоядерных источников нейтронов (ТИН) камеры этих установок будут подвергаться воздействию потоков дейтерия и трития, в связи с чем необходимо изучать взаимодействие изотопов водорода с материалами стенки, в том числе динамику накопления изотопов. Для будущих отечественных ТИН в качестве конструкционного материала предлагается использовать малоактивируемую ферритно-мартенситную сталь ЭК-181 (Русфер) [1]. К ее достоинствам можно отнести быстрый спад наведенной активности под действием нейтронного облучения, хорошие термомеханические свойства и широкий диапазон рабочих температур (573–973 К) [2].

Для прогнозирования количества водорода, которое будет захвачено в ЭК-181 в процессе эксплуатации ТИН, необходимо проводить численное моделирование экспериментов по захвату изотопов водорода в образцы этой стали. Компьютерное моделирование в сочетании с экспериментом позволяет определить параметры захвата дейтерия и трития – энергию связи водорода с ловушками и концентрацию ловушек в материале.

В программе TMAP7 были промоделированы термодесорбционные спектры (ТДС-спектры) образцов стали ЭК-181, полученные после выдержки в газообразном дейтерии при давлении 5 атмосфер и температурах 623–723 К. Определен тип ловушек (приповерхностные), их энергия связи с дейтерием (0,75 эВ) и концентрация (1,5 ат.%). Обнаружены аномалии в ТДС-спектрах в области высоких температур, выражающиеся в наличии узких пиков в высокотемпературной области. Изучено влияние оксидного слоя на форму спектров.

ЛИТЕРАТУРА

1. Голубева А. В. и др. Перспективные материалы 5–18 (2021) 4.
2. Леонтьева-Смирнова М. В. и др. Перспективные материалы 40–52 (2006) 6.

MODELING OF DEUTERIUM RETENTION IN EK-181 STEEL

A. Persianova¹, A. Golubeva¹, V. S. Efimov²

¹NRC «Kurchatov Institute», Moscow

²NRNU MEPhI, Moscow

During the operation of fusion reactors and fusion neutron sources (FNS), the vacuum vessels of these installations will be exposed to deuterium and tritium flows, and therefore it is necessary to study the interaction of hydrogen isotopes with wall materials and particularly the dynamics of isotope accumulation. For future domestic FNS, it is proposed to use low-activation ferritic-martensitic steel EK-181 (Rusfer) as a structural material [1]. Its advantages include a rapid decline in induced activity under neutron irradiation, good thermomechanical properties and a wide range of operating temperatures (573–973 K) [2].

To predict the amount of hydrogen that will be retained in EK-181 during the operation of FNS, it is necessary to carry out numerical modeling of experiments on the retention of hydrogen isotopes in samples of this steel. Computer modeling combined with experiment allows us to determine the parameters of deuterium retention – the hydrogen detrapping energies and trap concentrations.

The TDS spectra of EK-181 steel exposed in D₂ at a pressure of 5 bar at 623–723 K were simulated in the TMAP7. The type of traps (near-surface),

their detrapping energy (0,75 eV) and concentration (1,5 at. %) were determined. Anomalies in TDS spectra at high temperatures was discovered, that expressed in the presence of narrow peaks in the high- temperature region. The influence of the oxide layer on the shape of the spectra was studied.

REFERENCES

1. Golubeva A. V. et al. Perspektivnye materialy 5–18 (2021) 4.
2. Leontieva-Smirnova M. V. et al. Perspektivnye materialy 40–52 (2006) 6.

Шишкова Татьяна Александровна
НИЦ «Курчатовский институт»
Инженер-исследователь
123182, пл. Академика Курчатова, 1
Термоядерный синтез, изотопы водорода

Shishkova Tatyana
NRC Kurchatov institute
Research engineer
Ac. Kurchatov sq., 1, Moscow RU-123182
Fusion, hydrogen isotopes

anfimova_t_a@mail.ru



ИЗОТОПНЫЙ ОБМЕН ВОДОРОДА В СТАЛИ ЭК-181

*Т. А. Шишкова^{1,2}, Д. И. Черкез¹, А. В. Голубева¹, Н. О. Степанов¹,
Н. П. Бобырь¹, Д. А. Козлов¹, Д. С. Дугин¹, М. Б. Розенкевич², В. М. Чернов³*

¹НИЦ «Курчатовский институт», Москва

²Российский химико-технологический университет
им. Д. И. Менделеева, Москва

³ВНИИИМ им. А. А. Бочвара, Москва

Необходимость быстро извлекать тритий из материалов камеры термоядерных реакторов (ТЯР) потребует применения эффективных методов или комбинаций методов детритизации. Перспективным методом удаления трития из материалов является изотопный обмен. Данный метод основан на изотопном замещении трития в материалах при контакте с дейтерием или протием в виде газа или плазмы.

Ввиду высокой стоимости и сложности организации работы с радиоактивным тритием большинство экспериментальных работ по исследованию эффективности методов извлечения трития проводится с дейтерием.

В настоящей работе экспериментально моделировали влияние нейтронных повреждений на захват дейтерия в стали ЭК-181. Для моделирования дефектов, которые будут образовываться при облучении нейтронами ТЯР, образцы повредили путем облучения ионами Fe^{2+} с энергией 5,6 МэВ при температуре 327 °С. Поврежденные и неповре-

жденные образцы облучили дейтериевой плазмой при 200 °С до дозы 10^{25} ионов/м². Содержание дейтерия в образцах определялось методом термодесорбционной спектроскопии. Установлено, что облучение ионами Fe²⁺ до дозы повреждений 1 с.н.а. не приводит к увеличению захвата дейтерия в стали. При дозе повреждения 3 с.н.а. захват оказался заметно выше.

Для исследования изотопного обмена образцы, содержащие дейтерий после облучения дейтериевой плазмой, облучали водородной плазмой при тех же условиях. Термодесорбционный анализ содержания дейтерия в образцах до и после воздействия противной плазмы показал, что в результате изотопного обмена при плазменном облучении большая часть дейтерия была удалена из образцов как неповрежденных, так и предварительно поврежденных ионами железа. Полученные результаты для системы Н–D могут быть использованы для оценки применимости изотопного обмена в целях детритизации материалов термоядерных установок.

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

HYDROGEN ISOTOPE EXCHANGE IN EK-181 STEEL

*T. Shishkova^{1,2}, D. Cherkez¹, A. Golubeva¹, N. Stepanov¹, N. Bobyr¹,
D. Kozlov¹, D. Dugin¹, M. Rozenkevich², V. Chernov³*

¹National Research Center «Kurchatov Institute», Moscow

²Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow

³JSC VNIINM, Moscow

The need for quickly remove tritium from fusion reactor materials requires the use of effective detritization methods or combinations of these methods. A promising method of tritium removal from materials is an isotope exchange. This method is based on isotopic substitution of tritium in materials by exposure to deuterium or protium in the form of gas or plasma. Due to the high cost and complexity of organizing work with radioactive tritium, mostly an experimental work to study the effectiveness of tritium extraction methods is carried out with deuterium.

In this paper the effect of neutron damage on deuterium retention in EK-181 steel was experimentally modeled. To simulate defects that will be

formed when irradiated with fusion neutrons, the samples were damaged by irradiation with Fe^{2+} ions with an energy of 5,6 МэВ, at a temperature of 327 °C. Damaged and undamaged samples were irradiated with deuterium plasma at 200 °C to a dose of 10^{25} ions/m². The deuterium retention in the samples was determined by thermodesorption spectroscopy (TDS). It was found that irradiation with Fe^{2+} ions to a dose of 1 dpa does not lead to an increase in deuterium retention in steel, while at a dose of damage 3 dpa the deuterium retention was noticeably higher.

To study isotope exchange, samples saturated with deuterium after D-plasma irradiation were irradiated with hydrogen plasma. The parameters of irradiation with hydrogen plasma correspond to the parameters of irradiation with D-plasma. Thermal desorption analysis of the deuterium retention in samples before and after exposure to H-plasma showed that the isotope exchange makes it possible to remove most of the deuterium retention from samples both undamaged and previously damaged by iron ions. The results obtained for the H–D system can be used to assess the applicability of isotope exchange for the purpose of detritization of materials of fusion reactors.

This work was performed as part of the scientific program of the National Center for Physics and Mathematics, topic no. 8 «The Physics of Hydrogen Isotopes».

Родченкова Наталья Ивановна

Институт прикладных математических исследований

Карельского научного центра РАН

Старший научный сотрудник

185910, Республика Карелия,

г. Петрозаводск, ул. Пушкинская, 11,

ИПМИ КарНЦ РАН

Математическое моделирование физических процессов, численные методы решения краевых задач математической физики



Rodchenkova Natalia

Institute of Applied Mathematical Research,

Karelian Research Centre RAS

Senior Researcher

11 Pushkinskaya St., Petrozavodsk, 185910, Karelia

Mathematical modeling of physical processes,

numerical methods for solving boundary-value

problems in mathematical physics

nirodchenkova@krc.karelia.ru

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОДОРОДОПРОНИЦАЕМОСТИ
С ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНО ЗАВИСИМЫМ ОТ КОНЦЕНТРАЦИИ
КОЭФФИЦИЕНТОМ ДИФФУЗИИ**

Ю. В. Заика, Н. И. Родченкова

Институт прикладных математических исследований КарНЦ РАН

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: записаны дифференциальные уравнения для поверхностных концентраций атомарного водорода. Производная по времени участвует не только в диффузионном уравнении, но и в граничных условиях. Это существенно усложняет крайнюю задачу. Если иметь в виду общую теорию функционально-дифференциальных уравнений, то подобные задачи относятся к так называемому нейтральному типу и требуют развития более сложного математического аппарата.

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

NUMERICAL MODELING OF HYDROGEN PERMEABILITY WITH EXPONENTIALLY CONCENTRATION-DEPENDENT DIFFUSION COEFFICIENT

Yu. V. Zaika, N. I. Rodchenkova

Institute of Applied Mathematical Research, KarRC RAS

Studies on the interaction of hydrogen isotopes with structural materials are mainly necessitated by problems in the protection of metals against hydro-

gen corrosion and development of the hydrogen energy industry. We consider the nonlinear boundary-value problem corresponding to the following experiment. A membrane heated to a sufficiently high temperature served as the partition in the vacuum chamber. Degassing was performed in advance. A constant pressure of hydrogen gas was built up at the inlet side. The penetrating flux was determined by mass-spectrometry in the vacuum maintained at the outlet side.

When the concentration of dissolved atomic hydrogen reaches a certain level, the diffusion begins to essential slow down gradually. An exponential model of the dependence of the diffusion coefficient on concentration is adopted under such conditions. The temperature dependence conforms to the Arrhenius law. Such problems are well studied, but within the framework of standard boundary conditions. On the outlet side, the concentration of the diffusant in the near-surface bulk is assumed to be zero. At the inlet one, it is usually assumed that the concentration almost instantly (given relatively high pressure) reaches a local equilibrium level proportional to the root of the pressure (Siverts' law).

A significant drawback of this model is that the dynamics of surface processes of dissolution and sorption-desorption is left out of consideration. In the present study, these processes are taken into account in the form of nonlinear dynamic boundary conditions: differential equations are written for the surface concentrations of atomic hydrogen. The time derivative is involved not only in the diffusion equation, but also in the boundary conditions. This makes the boundary value problem significantly more complicated. If we keep in mind the general theory of functional differential equations, then such problems are of the so-called neutral type and require the development of a more complex mathematical technique.

The paper presents an iterative computational algorithm for solving a nonlinear boundary-value problem based on implicit difference schemes and presents the results of numerical simulations. After the model has been verified using specific experimental data, it becomes possible to numerically simulate various situations (for example, the reaction to an abrupt stepwise pattern of the inlet pressure) while saving on experimental costs.

Костикова Екатерина Константиновна
ФГБУН ФИЦ «Карельский научный центр РАН»
Старший научный сотрудник лаборатории
Моделирования природно-технических систем
Института прикладных математических
исследований
185910, г. Петрозаводск, ул. Пушкинская, д. 11
Математическое моделирование физических
процессов, численные методы решения краевых
задач математической физики

Kostikova Ekaterina

Karelian Research Centre of the Russian Academy
of Sciences

Senior Researcher in the Laboratory of Natural-
Technical System Modelling Institute of Applied
Mathematical Research

11 Pushkinskaya Street Petrozavodsk Karelia
185910, Russia

Mathematical modelling of physical processes,
boundary-value problems of mathematical physics,
numerical methods

kostikova@krc.karelia.ru



**ОЦЕНКА ПОВЕРХНОСТНЫХ ПАРАМЕТРОВ
ТЕРМОДЕСОРБЦИИ ВОДОРОДА
МЕТОДОМ СОПРЯЖЕННЫХ УРАВНЕНИЙ**

Ю. В. Заика, Е. К. Костикова

ФГБУН ФИЦ «Карельский научный центр РАН»

Интерес к взаимодействию изотопов водорода с конструкционными материалами вызван, в частности, проблемами защиты от водородной коррозии и перспективами водородной энергетики. 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 (микроросты, границы зерен и другие неоднородности). Затем с помощью методики Киссинджера оценивают предэкспоненты (частотные множители) и энергии связи.

Численное моделирование (рассматривается нелинейная диффузионная краевая задача с динамическими граничными условиями для поверхностной концентрации) 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.

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.

ESTIMATION OF SURFACE PARAMETERS OF HYDROGEN THERMODESORPTION BY THE METHOD OF CONJUGATE EQUATIONS

Yu. Zaika, E. Kostikova

Karelian Research Centre of the Russian Academy of Sciences

Interest in the interaction of hydrogen isotopes with structural materials is caused, in particular, by the problems of protection against hydrogen corrosion and the future of hydrogen energy. Thermodesorption spectrometry (TDS) is one of the effective experimental methods. A sample pre-saturated with dissolved hydrogen at a sufficiently high temperature is slowly (in practice usually linearly) heated in a vacuum chamber. A mass spectrometer is used to determine the degassing flux. The dependence of the flux on the current temperature gives the thermodesorption spectrum. This information is used to estimate the characteristics of the structural material interacting with hydrogen. The spectrum often consists of several isolated peaks. Their interpretation is the task of analysing the spectrum.

The following scheme is usually used. The spectrum is decomposed into a sum of Gaussians. Each of them is interpreted as reactions of the first or second order, operating with the volume-averaged hydrogen concentration and binding energies in various traps (microcavities, grain boundaries and other inhomogeneities). The pre-exponents (frequency multipliers) and binding energies are then estimated using the Kissinger method.

A nonlinear diffusion boundary value problem with dynamic boundary conditions for surface concentration is considered. Numerical modelling shows that another scenario is also possible. For definiteness we will mean the degassing of a thin plate. First, as the plate heats up, desorption from the surface and from the near-surface volume occurs (the first peak). The temperature increases and a large concentration gradient is formed near the surface. There is a significant activation of diffusion from the volume to the surface and a second peak of degassing is observed.

Numerical modelling (not only of thermodesorption but also of hydrogen permeability under different external conditions) requires estimates of the model parameters. These are inverse problems of mathematical physics, the solution of which requires more complex mathematical apparatus than for direct problems. A variety of methods, both experimental and theoretical, have been developed to determine the diffusion coefficient. The surface parameters (adsorp-

tion, desorption, dissolution in volume) are much more complicated, as they depend significantly even on the technique of preliminary sample preparation.

The report presents an algorithm for estimating surface parameters from the results of the TDS experiment. The theory of conjugate equations of mathematical physics is used to obtain the necessary relations.

Егоров Александр Александрович

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

Студент

115409, Москва, Каширское шоссе, д. 31

Прикладные математика и физика

Egorov Aleksander Aleksandrovich

National Research Nuclear University MEPHI

(Moscow Engineering Physics Institute)

Student

Kashirskoye Highway, 31, Moscow, 115409

Applied mathematics and physics

79051807621@yandex.ru



**РЕАЛИЗАЦИЯ МЕТОДИКИ РАСЧЕТА КОЭФФИЦИЕНТОВ
ПЕРЕНОСА ДЛЯ ГАЗОВЫХ СМЕСЕЙ ИЗОТОПОВ ВОДОРОДА
И ГЕЛИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МОЛЕКУЛЯРНО-
ДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ**

А. А. Егоров, Ю. А. Богданова, И. В. Маклашова

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

В данной работе применена методика Грина-Кубо [1] для расчета коэффициентов переноса (вязкость и теплопроводность) в газовых смесях на основе молекулярно-динамического (МД) моделирования на примере гелия и водорода, а также их бинарных смесей и был разработан алгоритм обработки данных, полученных в ходе МД моделирования на основе открытого программного пакета LAMMPS [2] с использованием высокопроизводительных вычислительных систем.

Метод Грина-Кубо устанавливает связь коэффициентов теплопроводности κ и сдвиговой вязкости η с временными корреляциями спонтанных потоков тепла и полного импульса соответственно. Было выяснено что, для газовых систем (водорода и гелия) значения корреляции стремятся к нулю, но после определенного момента появляются случайные шумы, которые негативно влияют на итоговые значения коэффициентов.

Был разработан алгоритм, реализованный в виде компьютерной программы, позволяющий по имеющимся данным выбрать необходимую длину корреляции, обрезав шумы, и рассчитать значения коэффициентов теплопроводности и вязкости. Данный алгоритм показал повышение точности результатов расчетов в сравнении с данными [3].

ЛИТЕРАТУРА

1. D. J. Evans, G. P. Morriss. Theoretical Chemistry Monograph Series – Canberra: ANU Press, 2008.
2. LAMMPS - A flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales, *Comp. Phys. Comm.* 271, 108171 (2022).
3. NIST Chemistry WebBook, SRD 69. – URL: <https://webbook.nist.gov/chemistry/>.

IMPLEMENTATION OF A METHODOLOGY FOR CALCULATION OF THE TRANSPORT COEFFICIENTS FOR GAS SYSTEMS CONTAINING HELIUM AND HYDROGEN ISOTOPES USING MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION

A. A. Egorov, Yu. A. Bogdanova, I. V. Maklashova

National Research Nuclear University MPhI
(Moscow Engineering Physics Institute)

The Green-Kubo method [1] was used to calculate the transport properties (viscosity and thermal conductivity) of gas systems based on molecular dynamics (MD) modeling using the example of helium and hydrogen, as well as their binary mixtures, and an algorithm was developed for processing data obtained during MD modeling based on the open software package LAMMPS [2] using high-performance computing systems.

The Green-Kubo method gives a relationship between the coefficients of thermal conductivity κ and shear viscosity η with time correlations of spontaneous heat fluxes and total impulse, respectively. It was found that for gas systems (hydrogen and helium) the correlation values tend to zero, but after a certain point random noise appears, which negatively affects the accuracy of the final values of the coefficients.

An algorithm was developed, implemented in the form of a computer program, which allows, based on the available data, to select the required correlation length, cutting off noise, and to calculate the values of the thermal conductivity and viscosity coefficients. This algorithm has shown improved consistency of calculation results with experimental data [3].

REFERENCES

1. D. J. Evans, G. P. Morriss. Theoretical Chemistry Monograph Series – Canberra: ANU Press, 2008.
2. LAMMPS - A flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales, Comp. Phys. Comm. 271, 108171 (2022).
3. NIST Chemistry WebBook, SRD 69. – URL: <https://webbook.nist.gov/chemistry/>.

Смаль Арина Сергеевна

Национальный исследовательский ядерный
университет «МИФИ»

Лаборант

Москва, Каширское шоссе, д. 31

Методы квантовой молекулярной динамики для
моделирования процессов с участием изотопов
водорода и гелия

Smal Arina Sergeevna

National Research Nuclear University MEPHI

(Moscow engineering physics institute)

Moscow, Kashirskoe shosse, 31

arina.smal@mail.ru



ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ КВАНТОВОГО МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ СВОЙСТВ ИЗОТОПОВ ВОДОРОДА И ИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ С ПОВЕРХНОСТЬЮ МЕТАЛЛОВ

*А. С. Смаль¹, Ю. А. Богданова¹, И. В. Маклашова¹, В. Ю. Королев²,
А. А. Селезнев^{1,2}*

¹Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

²Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики

Для моделирования и анализа свойств материалов на атомарном уровне широко применяется метод функционала плотности (МФП), который позволяет описывать электронную структуру ансамбля атомов на основе распределения электронной плотности.

Фундаментальными уравнениями в рамках МФП, описывающими поведение электронов в ансамбле атомов, являются уравнения Кона-Шэма, основная идея которых заключается в разделении электронной плотности на набор невзаимодействующих квазичастиц, каждая из которых движется в эффективном потенциале, создаваемом остальными электронами и ядрами ансамбля. В этом случае вычисление энергии ансамбля сводится к задаче поиска минимума функционала энергии для определения энергетического состояния системы и ее структурных характеристик.

В работе МФП проведены расчеты энергии связи в молекулах изотопов водорода в зависимости от межъядерного расстояния. Результаты

расчетов показали, что длины связи в молекулах изотопов водорода близки вследствие их одинаковой химической структуры, а значения энергии связи не совпадают из-за различия энергии нулевых колебаний рассматриваемых молекул. Атом протия в молекуле водорода имеет наименьшую энергию связи.

В работе также с использованием МФП и программного пакета Quantum ESPRESSO [1] проведены расчеты энергии взаимодействия молекул H_2 и CO с поверхностью ряда металлов и гидридов металлов. Определены центры адсорбции для молекул CO на поверхности гидрида палладия. Создана модель поверхности для кристаллического алюминия, гидрида алюминия и гидрида палладия. Для моделирования поверхности рассматриваемых материалов проведена оптимизация геометрии элементарных ячеек и расчетных суперячеек. Для визуализации рассматриваемых атомных структур использовались программы для атомистического моделирования BURAI [2].

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. Home Page - Quantum Espresso (quantum-espresso.org).
2. <https://burai.readthedocs.io/en/latest/>.

APPLICATION OF THE METHODS OF QUANTUM MOLECULAR DYNAMIC MODELING TO STUDY THE PROPERTIES OF HYDROGEN ISOTOPES AND THEIR INTERACTION WITH METAL SURFACES

A. S. Smal, Yu. A. Bogdanova, I. V. Maklashova, V. Yu. Korolev, A. A. Selezenev

National Research Nuclear University MEPhI
(Moscow Engineering Physics Institute)
Russian Federal Nuclear Center – All-Russian Research Institute
of Experimental Physics

To model and analyze the properties of materials at the atomic level, the density functional method (DFT) is widely used, which allows one to describe

the electronic structure of an ensemble of atoms based on the electron density distribution.

The fundamental equations within the framework of the DFT method that describe the behavior of electrons in an ensemble of atoms are the Kohn-Sham equations, the main idea of which is to divide the electron density into a set of non-interacting quasiparticles, each of which moves in the effective potential created by the remaining electrons and nuclei of the ensemble. In this case, calculating the energy of the ensemble is reduced to the problem of finding the minimum of the energy functional to determine the energy state of the system and its structural characteristics.

The DFT work carried out calculations of the binding energy in molecules of hydrogen isotopes depending on the internuclear distance. The calculation results showed that the bond lengths in the hydrogen isotopes are close due to their identical chemical structure, and the bond energies do not coincide due to the difference in the energy of zero-point vibrations of the molecules under consideration. The protium atom in a hydrogen molecule has the lowest binding energy.

The work also used density functional theory methods and the Quantum ESPRESSO software package [1] to calculate the energy of interaction of H₂ and CO with the surface of a number of metals and metal hydrides. Adsorption centers for carbon monoxide molecules on the surface of palladium hydride have been determined. A surface model has been created for crystalline aluminum, aluminum hydride and palladium hydride. To model the surface of the materials under consideration, the geometry of elementary cells and corresponding supercells was optimized. To visualize the atomic structures under consideration, the BURAI atomistic modeling programs were used [2].

The work was carried out within the framework of the scientific program of the National Center of Physics and Mathematics (project 8 «Hydrogen Isotope Physics», direction 8.1 «Research in the field of interaction of hydrogen isotopes with solids»).

REFERENCES

1. Home Page - Quantum Espresso (quantum-espresso.org).
2. <https://burai.readthedocs.io/en/latest/>.

Кузенов Сергей Ризабекович

СПбГУТ им. проф. М. А. Бонч-Бруевича
Старший преподаватель кафедры Физики
Санкт-Петербург, пр. Большевиков, д. 22/1
Физическая химия, водородная энергетика,
материаловедение

Kuzenov Sergei

Saint Petersburg State University
of Telecommunications
Senior Lecturer at the Department of Physics
Saint Petersburg, st. Bolshevikov, 22/1
Physical chemistry, hydrogen energy, Materials
science

skuzenov@ya.ru



**ВЛИЯНИЕ УГЛЕРОДСОДЕРЖАЩИХ ГАЗОВ
НА ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТЬ МЕМБРАН ИЗ МЕТАЛЛОВ
5 ГРУППЫ С ЗАЩИТНО-КАТАЛИТИЧЕСКИМ ПАЛЛАДИЕВЫМ
ПОКРЫТИЕМ**

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

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

Плотные металлические мембраны обладают 100 %-й селективностью по водороду и способны за одну стадию извлекать из газовых смесей водород чистотой >99,99999 %. Обычно для извлечения сверхчистого водорода из газовых смесей используются мембраны из палладия и его сплавов, однако недостаточная производительность и высокая стоимость данных мембран резко ограничивает область их применения. Альтернативой палладиевым мембранам могут быть мембраны из металлов 5 группы, в которых скорость транскристаллического переноса растворенного водорода почти на два порядка выше, чем в палладии [1, 2]. Следовательно, из металлов 5 группы возможно создать мембраны гораздо большей производительности и меньшей стоимости по сравнению с палладиевыми мембранами. [3]. Для использования мембран из металлов 5 группы на прак-

тике необходимо обе стороны мембраны покрыть тонким слоем Pd, который обеспечивает катализ диссоциативно-ассоциативных процессов при абсорбции-десорбции молекул H_2 .

Однако, при работе таких мембран с палладиевым покрытием с углеродсодержащими газами, образующимися при паровом риформинге углеводородных топлив, каталитическая активность может быть резко замедлена из-за механизма конкурентной адсорбции углеродсодержащих газов [4, 5]. В этом случае величину проникающего потока может полностью определять кинетика процессов абсорбции-десорбции молекул H_2 на палладиевом покрытии и скорость транскристаллического переноса растворенного в металле водорода не будет играть роли на производительность мембран [6].

В работе экспериментальным путем определено влияние таких углеродсодержащих газов как CH_4 , CO и CO_2 на производительность мембран из ОЦК сплава ванадия, имеющей палладиевое покрытие в условиях, близких к эксплуатации водород-проницаемых мембран [7] и определена обратимость снижения проникающего потока H_2 после работы мембраны с перечисленными газами.

ЛИТЕРАТУРА

1. E. Fromm, E. (Eds.) Gebhardt Gase und Kohlenstoff in Metallen / Fromm E., Gebhardt E. – Berlin.: Springer. 1976. V. 74. P. 747.
2. T. Schober Vanadium. Niobium- and Tantalum-Hydrogen // Solid State Phenomena. 1996. V. 49. P. 357–422.
3. V. N. Alimov, A. O. Busnyuk, M. E. Notkin, A. I. Livshits. Pd-V-Pd composite membranes: Hydrogen transport in a wide pressure range and mechanical stability // J. Memb. Sci. 2014. V. 457. P. 103–112.
4. M. Eriksson, L. G. Ekedahl Real time measurements of hydrogen desorption and absorption during CO exposures of Pd: hydrogen sticking and dissolution // Applied Surface Science. 1998. V. 133. P. 89.
5. G.Xingcai and T. Y. John Dependence of effective desorption kinetic parameters on surface coverage and adsorption temperature: CO on Pd (111) // J. Chem. Phys. 1989. V. 90. P. 6761.
6. V. N. Alimov, Y. Hatano, A. O. Busnyuk, D. A. Livshits, M. E. Notkin, A. I. Livshits. Hydrogen permeation through the Pd–Nb–Pd composite membrane: Surface effects and thermal degradation // Int. J. Hydrogen Energy (2011) 7737–7746.

7. Hydrogen separation membrane module / Nippon Seisen Co., Ltd. URL. – Режим доступа: <https://www.n-seisen.co.jp/en/development/development001.html> (дата обращения: 17.04.24).

THE INFLUENCE OF CARBONACEOUS GASES ON THE PERFORMANCE OF MEMBRANES MADE OF GROUP 5 METALS WITH CATALYTIC PD COATING

S. R. Kuzenov, V. N. Alimov, A. O. Busnyuk, A. I. Livshits, E. Yu. Peredistov

Saint Petersburg State University of Telecommunications

The dense metal membranes have 100 % hydrogen selectivity and are capable of extracting 99,99999 % hydrogen from gas mixtures in one stage. Membranes made of palladium and its alloys are usually used to extract ultrapure hydrogen from gas mixtures, but the insufficient performance and high cost of these membranes sharply limit their scope of application. An alternative to palladium membranes can be membranes made of group 5 metals, in which the rate of transcrystalline transport of dissolved hydrogen is almost two orders of magnitude higher than in palladium [1, 2]. Consequently, membranes with much higher productivity and lower cost can be made from group 5 metals compared to palladium membranes [3]. To use membranes made of group 5 metals, it is necessary to cover both sides of the membrane with a thin layer of Pd, which provides catalysis of dissociative-associative processes during absorption-desorption of H₂ molecules.

However, when this palladium-coated membranes working with carbon-containing gases formed in process the steam reforming of hydrocarbon fuels, the catalytic activity can be sharply decreased due to the mechanism of competitive adsorption of carbon-containing gases [4, 5]. In this case, the magnitude of the permeation flow can be completely determined by the kinetics of the absorption-desorption processes of H₂ molecules on a palladium coating. The rate of transcrystalline transfer of hydrogen dissolved in metal will not play a role on the performance of membranes [6]. The work experimentally determined the effect of such carbonaceous gases as CH₄, CO and CO₂ on the performance of membranes made of BCC vanadium alloy. This membrane is coating palladium layers and tested under conditions working of hydrogen-permeable membranes [7]. The determined the reversibility of reducing the penetrating flow of H₂ after the membrane works with the listed gases.

REFERENCES

1. E. Fromm, E. (Eds.) Gebhardt Gase und Kohlenstoff in Metallen / Fromm E., Gebhardt E. – Berlin.: Springer. 1976. V. 74. P. 747.
2. T. Schober Vanadium. Niobium- and Tantalum-Hydrogen // Solid State Phenomena. 1996. V. 49. P. 357–422.
3. V. N. Alimov, A. O. Busnyuk, M. E. Notkin, A. I. Livshits. Pd-V-Pd composite membranes: Hydrogen transport in a wide pressure range and mechanical stability // J. Memb. Sci. 2014. V. 457. P. 103–112.
4. M. Eriksson, L. G. Ekedahl Real time measurements of hydrogen desorption and absorption during CO exposures of Pd: hydrogen sticking and dissolution // Applied Surface Science. 1998. V. 133. P. 89.
5. G.Xingcai and T. Y. John Dependence of effective desorption kinetic parameters on surface coverage and adsorption temperature: CO on Pd (111). // J. Chem. Phys. 1989. V. 90. P. 6761.
6. V. N. Alimov, Y. Hatano, A. O. Busnyuk, D. A. Livshits, M. E. Notkin, A. I. Livshits. Hydrogen permeation through the Pd–Nb–Pd composite membrane: Surface effects and thermal degradation // Int. J. Hydrogen Energy (2011) 7737-7746.
7. Hydrogen separation membrane module / Nippon Seisen Co., Ltd. URL. – Режим доступа:<https://www.n-seisen.co.jp/en/development/development001.html> (дата обращения: 17.04.24).

Ефимов Сергей Андреевич

Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева
Выпускник, поступающий в аспирантуру
125047, Москва, Миусская площадь, 9
Изотопный обмен, изучение свойств
металлических нанокатализаторов,
наноматериалы

Efimov Sergey

D. Mendeleev University of Chemical Technology
of Russia
Graduate entering graduate school
125047, Russia, Moscow, Miusskaya Sq., 9
Isotopic exchange, study of the properties of metal
nanocatalysts, nanomaterials
sir10.efimov@mail.ru

**ВЛИЯНИЕ СРЕДЫ ВОДОРОДА НА ПРОЦЕСС РАЗЛОЖЕНИЯ
ПРЕКУРСОРОВ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОКАТАЛИЗАТОРОВ
ГОМОМОЛЕКУЛЯРНОГО ИЗОТОПНОГО ОБМЕНА**

С. А. Ефимов, О. А. Боева

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

Исследование катализаторов гомомолекулярного изотопного обмена занимает важное место в работе с изотопами водорода. Отдельную группу среди них составляют катализаторы, получаемые методом пропитки носителя растворами прекурсоров (солей металлов) с дальнейшим термическим разложением. Целью данной работы является изучение способности водорода к снижению температуры разложения прекурсоров.

В работе представлены результаты исследования прекурсоров катализаторов на основе наночастиц металлов I-Б группы, полученных методом пропитки. Показано, что наличие среды водорода приводит к снижению температуры разложения, и этот эффект различен для систем, полученных разными способами нанесения. Так, у образцов Au и Ag снизилась температура первого пика, в то время как температура второго почти не изменилась. У образца Au@Ag процесс разложения в водороде протекает

в одну стадию, в отличие от разложения в вакууме. У образца Ag@Au процесс разложения в водороде протекает при более низкой температуре, чем в вакууме. Помимо прочего, при разложении в водороде образцов структуры «ядро-оболочка» Au@Ag и Ag@Au появился высокотемпературный пик 430–460 °С, соответствующий восстановлению хлорида серебра.

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

INFLUENCE OF A HYDROGEN ENVIRONMENT ON THE PROCESS OF DECOMPOSITION OF PRECURSORS OF METAL NANOCATALYSTS OF HOMOMOLECULAR ISOTOPE EXCHANGE

S. A. Efimov, O. A. Boeva

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow

The study of homomolecular isotope exchange catalysts occupies an important place in work with hydrogen isotopes. A separate group among them consists of catalysts obtained by impregnating a support with solutions of precursors (metal salts) with further thermal decomposition. The purpose of this work is to study the ability of hydrogen to reduce the decomposition temperature of precursors.

The paper presents the results of a study of catalyst precursors based on group I-B metal nanoparticles obtained by impregnation. It has been shown that the presence of a hydrogen leads to a decrease in the decomposition temperature, and this effect is different for systems obtained by different deposition methods. Thus, for the Au and Ag samples the temperature of the first peak decreased, while the temperature of the second remained almost unchanged. For the Au@Ag sample, the decomposition process in hydrogen occurs in one stage, in contrast to decomposition in vacuum. For the Ag@Au sample, the decomposition process in hydrogen occurs at a lower temperature than in vacuum. Among other things, during the decomposition of core-shell Au@Ag and Ag@Au samples in hydrogen, a high-temperature peak of 430–460 °С appeared, corresponding to the reduction of silver chloride.

The work is performed in the framework of the development program «Priority-2030» of the Mendeleev University of Chemical Technology of Russia.

Секция 2

A7–A9, B6–B9

**МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА
И СТРУКТУРНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ
КОНСТРУКЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ
В СРЕДЕ ВОДОРОДА**

Session 2

**MECHANICAL PROPERTIES
AND STRUCTURAL TRANSFORMATIONS
OF STRUCTURAL MATERIALS
IN A HYDROGEN ENVIRONMENT**

Чувильдеев Владимир Николаевич

Нижегородский государственный университет

им. Н. И. Лобачевского,

Директор научно-исследовательского

физико-технического института ННГУ

им. Н. И. Лобачевского

603022, Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23,

корп. 3

Физическое материаловедение

Процессы диффузии

Границы зерен

Chuvil'deev Vladimir N.

Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod

Head of the Scientific Research Institute of Physics

and Technology of Lobachevsky State University of

Nizhny Novgorod

603022 Nizhny Novgorod, 23 Prospekt Gagarina

(Gagarin Avenue) BLDG 3

Materials science

Diffusion

Grain boundaries

chuvildeev@nifti.unn.ru



НЕРАВНОВЕСНЫЕ ГРАНИЦЫ ЗЕРЕН. ТЕОРИЯ И ПРИЛОЖЕНИЯ

В. Н. Чувильдеев

Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского

Изложены основы теории границ зерен, позволяющей описывать термодинамические и диффузионные свойства равновесных и неравновесных границ зерен [1].

В качестве параметра, характеризующего структурное состояние границы, использована величина относительного свободного объема. Получены выражения для свободной энергии, энтальпии и энтропии границы, позволяющие связать эти характеристики со стандартными термодинами-

ческими константами материалов, термодинамическими параметрами поверхности раздела жидкость-кристалл и величиной свободного объема границы.

Получены выражения для энергии активации, активационного объема и предэкспоненциального множителя коэффициента зернограничной самодиффузии, позволяющие связать эти характеристики со стандартными термодинамическими константами материалов, термодинамическими параметрами поверхности жидкость-кристалл, диффузионными параметрами расплавов и величиной свободного объема границы.

Построена модель структуры неравновесных границ зерен, представляющая собой обобщение модели на случай границ, обладающий избыточным свободным объемом. Получены выражения для оценки избыточной свободной энергии и аномальных диффузионных характеристик неравновесных границ при заданной величине избыточного свободного объема. Показано, что небольшие изменения свободного объема границ линейно изменяют энергию границы и весьма существенно (экспоненциально) изменяют коэффициент зернограничной самодиффузии.

Рассмотрены приложения теории к решению задач рекристаллизации, фрагментации, сверхпластичности, ползучести и др.

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

ЛИТЕРАТУРА

1. В. Н. Чувильдеев. Неравновесные границы зерен в металлах. Теория и приложения. М: ФИЗМАТЛИТ. (2004) 304 с.

NON-EQUILIBRIUM GRAIN BOUNDARIES. THEORY AND APPLICATIONS

V. N. Chuvil'deev

Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod

The fundamentals of the theory of grain boundaries are expounded. It makes it possible to describe the thermodynamic and diffusion properties of equilibrium and nonequilibrium grain boundaries [1].

The value of the relative free volume is used as a parameter characterizing the structural state of the boundary. Expressions for the free energy, enthalpy and entropy of the boundary are obtained, which allow us to associate these characteristics with standard thermodynamic constants of materials, thermodynamic parameters of the liquid-crystal interface and the value of the free volume of the boundary.

Expressions for the activation energy, activation volume, and pre-exponential factor of the grain boundary self-diffusion coefficient are obtained, allowing these characteristics to be associated with standard thermodynamic constants of materials, thermodynamic parameters of the liquid-crystal interface, diffusion parameters of melts, and the value of the free volume of the boundary.

A model of the structure of nonequilibrium grain boundaries is constructed, which is a generalization of the model for the case of boundaries with excessive free volume. Expressions are obtained for estimating the excess free energy and abnormal diffusion characteristics of nonequilibrium boundaries for a given amount of excess free volume. It is shown that small changes in the free volume of the boundaries linearly change the energy of the boundary and very significantly (exponentially) change the coefficient of grain boundary self-diffusion.

Applications of the theory to solving problems of recrystallization, fragmentation, superplasticity, creep, etc. are considered.

The research was supported by Ministry of Education and Science of Russia (project FSWR-2023-0037).

REFERENCES

1. V. N. Chuvil'deev. Nonequilibrium grain boundaries in metals. Theory and applications. M: PHYSMATLIT. (2004) 304 p. [In Russian].

Литовченко Игорь Юрьевич

Институт физики прочности и материаловедения
СО РАН

Ведущий научный сотрудник
634055, г. Томск, пр-т Академический, 2/4
Конструкционные стали ядерной энергетики,
дефектная микроструктура, фазовый состав,
механические свойства

Litovchenko Igor

Institute of Strength Physics and Materials Science
SB RAS

Leading Researcher
2/4, pr. Akademicheskii, Tomsk, 634055, Russia
Structural steels of nuclear power engineering,
deformed microstructure, phase
composition, mechanical properties

E-mail: litovchenko@ispms.ru



МАЛОАКТИВИРУЕМЫЕ АУСТЕНИТНЫЕ СТАЛИ

*И. Ю. Литовченко^{1,2}, Н. А. Полехина¹, С. А. Аккузин¹, К. В. Спиридонова¹,
В. В. Осипова^{1,2}, А. В. Ким^{1,2}, В. М. Чернов³*

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, г. Томск

²Томский государственный университет, г. Томск

АО «ВНИИНМ им. акад. А. А. Бочвара», Москва

Малоактивируемые хромомарганцевые аустенитные стали системы Fe–12Cr–(20–25)Mn–C были предложены [1] в качестве альтернативы хромоникелевым аустенитным сталям ЭК-164 и ЧС-68, используемым в настоящее время в качестве конструкционных материалов оболочек тепловыделяющих элементов и других элементов первой стенки ядерных реакторов, а также в качестве возможных материалов термоядерных энергетических установок. Существенным преимуществом этих сталей является быстрый спад наведенной радиоактивности (малоактивируемость), достигаемый за счет отсутствия (минимизации) в составе сталей высокоактивируемых элементов (Ni, Mo, Co, и др.). Поскольку в таких сталях стабилизация аустенита осуществляется только за счет Mn и C, то иссле-

дованные составы хромомарганцевых сталей [1] уступали по стабильности аустенита хромоникелевым сталям.

В докладе представлены результаты исследований авторов [2, 3] по разработке новых малоактивируемых аустенитных сталей Fe–11Cr–(26–29)Mn–W–V–Ti–Ta–Zr–C с повышенной стабильностью аустенита (никелевый эквивалент сталей по диаграмме Шеффлера имеет значения сравнимые с соответствующими значениями для высокоактивируемых хромоникелевых сталей). Обсуждаются особенности микроструктуры и механические свойства новых сталей в закаленном и холоднодеформированном состояниях, а также после длительного старения при 700 °С в этих состояниях. Показано, что для сталей характерны планарные дислокационные субструктуры, дефекты упаковки, дисперсные частицы карбидов MC (M–Ti, V, Ta, и др.) и $M_{23}C_6$ (M–Cr, Mn, Fe), высокая плотность микро- и нанодвойников деформации. Длительное старение приводит к выделению и росту частиц $M_{23}C_6$ на границах зерен, некогерентных и когерентных двойниковых границах и на грубодисперсных частицах MC. Зеренная и микродвойниковая структура в условиях старения остается стабильной, что обеспечивает сохранение хорошего уровня механических свойств.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-19-00802, <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.

LOW-ACTIVATION AUSTENITIC STEELS

*I. Yu. Litovchenko^{1,2}, N. A. Polekhina¹, S. A. Akkuzin¹, K. V. Spiridonova¹,
V. V. Osipova^{1,2}, A. V. Kim^{1,2}, V. M. Chernov³*

¹Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, Tomsk

²National Research Tomsk State University, Tomsk

³JSC «A. A. Bochvar High-Technology Research Institute of Inorganic Materials», Moscow

Low-activation Cr–Mn austenitic steels of the Fe–12Cr–(20–25)Mn–C system were proposed [1] as an alternative to Cr–Ni austenitic steels of the

EK-164 and ChS-68, currently used as fuel shells structural materials and other parts of the first wall of nuclear reactors, as well as possible materials for thermonuclear application. A significant advantage of these steels is the rapid decay of induced radioactivity (low-activation), due to the minimization of highly activated elements (Ni, Mo, Co, etc.). Since in these steels austenite is stabilized only by Mn and C, the studied compositions of Cr-Mn steels [1] were lack in austenite stability compared to chromium-nickel steels.

The report presents the original research [2, 3] on the development of new low-activation austenitic steels Fe–11Cr–(26–29)Mn–W–V–Ti–Ta–Zr–C with increased austenite stability (with comparable of Ni_{eqv} to highly activation Cr-Ni steels). The features of the microstructure and mechanical properties of new steels in the quenched and cold-rolled states, as well as after long-term aging at 700 °C, are discussed. It has been shown the presence of planar dislocation substructures, stacking faults, dispersed particles of MC (M–Ti, V, Ta, etc.) and $M_{23}C_6$ (M–Cr, Mn, Fe) carbides, high density of deformation micro- and nanotwins. Long-term aging leads to the precipitation and growth of $M_{23}C_6$ particles at grain and twin boundaries, on coarse MC particles. The grain and microtwin structure remains stable under aging conditions, which ensures a good level of mechanical properties of steels.

The study was funded by a grant of the Russian Science Foundation Project No. 22-19-00802, <https://rscf.ru/project/22-19-00802/>.

REFERENCES

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. 12(12) (2022) 2106.
3. I. Litovchenko et al. Metals. 13(12), (2023) 2015.

Канашенко Сергей Леонидович

Институт Биомедицинской химии

им. В. Н. Ореховича

Ведущий инженер

Москва, ул. Погодинская, 10, стр. 8

Электронная микроскопия

Kanashenko S. L.

Institute of Biomedical Chemistry

Leading engineer

Moscow, Pogodinskaya st., 10, build 8

Electron microscopy

serkanash@mail.ru



ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ИЗОТОПОВ ВОДОРОДА С ГРАФИТОМ. ОБЗОР

С. А. Канашенко

В лекции рассматривается взаимодействие между изотопами водорода и графитом при температурах 500–1000 °С при парциальном давлении водорода в несколько сот Па, что представляет собой как академический интерес, так и практическое значение для обращения с тритием, производимым в реакторах деления и термоядерного синтеза.

Доминирующим механизмом поглощения водорода в интересующих условиях является хемосорбция на дефектах графита. Накопление изотопов водорода в графите зависит от температуры, давления, микроструктуры и его химической активности.

Для описания взаимодействия и накопления водорода с графитом, предложены изотермы адсорбции Ленгмюра. Проведены оценки энтропии и энтальпии адсорбции с учетом эффектов релаксации оборванных sp^2 -связей.

В обзоре проанализированы три вида ловушек:

- краевые атомы углерода внутри зерна с энтальпией адсорбции – 4,4 эВ/ H_2 (нерелаксированные связи, Ловушка 1),
- краевые атомы углерода на поверхности зерен с энтальпией адсорбции – 2,3 эВ/ H_2 (релаксированные связи, Ловушка 2), и базисная плоскость центры адсорбции с энтальпией +2,43 эВ/ H_2 (Ловушка 3).

В данной лекции представлены как теоретические модели, так и результаты многих исследований по поглощению водорода при различных температурах, что актуально для приложений по хранению водорода, а также его поглощению и выделению.

Голубева Анна Владимировна
НИЦ «Курчатовский институт»
Начальник лаборатории
Россия, Москва, пл. Академика Курчатова, д. 1
Водород, материалы, ТЯР

Golubeva Anna Vladimirovna
NRC Kurchatov Institute
Head of laboratory
Russia, Moscow, sq. Academician Kurchatov, 1
Hydrogen, materials, fusion

Golubeva_av@nrcki.ru



ВОЛЬФРАМ КАК МАТЕРИАЛ ЗАЩИТНОЙ ОБЛИЦОВКИ КАМЕРЫ ТЕРМОЯДЕРНОГО РЕАКТОРА – ОБЗОР ПРОБЛЕМ И ПУТЕЙ ИХ РЕШЕНИЯ

А. В. Голубева

НИЦ «Курчатовский институт»

Термоядерный реактор – установка, в которой протекает реакция синтеза тяжелых изотопов из более легких с выделением энергии. В первую очередь будет реализована реакция на смеси тяжелых изотопов водорода:



Доступные конструкционные материалы не смогут выдержать ожидаемые в термоядерном реакторе нагрузки, поэтому стенку вакуумной камеры реактора необходимо защитить от воздействия потоков частиц и энергии. На сегодняшний день вольфрам – наиболее изученный, распространенный и перспективный материал защитной облицовки термоядерных установок. Несомненное достоинства вольфрама – его высокая термостойкость и низкая активация под нейтронным облучением. Основным недостатком вольфрама как материала термоядерных установок – хрупкость при температуре ниже 200–400 °С. Из-за нейтронного облучения температура хрупко-пластичного перехода повышается до 700 °С и более,

поэтому вольфрамовая облицовка может оказаться хрупкой при рабочих условиях термоядерного реактора. Кроме того, при повышенных температурах в контакте с кислородом вольфрам интенсивно окисляется, из-за чего следствием прорыва в камеру реактора воды или атмосферы может стать необходимость масштабных ремонтных работ. Для использования в промышленных термоядерных установках желательно избавиться от недостатков вольфрама, сохранив достоинства этого материала. Данный обзор посвящен усилиям мирового термоядерного сообщества по оптимизации свойств вольфрама.

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

TUNGSTEN AS PLASMA-FACING MATERIAL OF A FUSION REACTOR – AN OVERVIEW OF PROBLEMS AND WAYS TO SOLVE THEM

A. V. Golubeva

NRC «Kurchatov Institute»

A fusion reactor is an installation where the reaction of synthesis of heavy isotopes from lighter ones proceeds with the release of energy. First of all, the reaction will be carried out on a mixture of heavy hydrogen isotopes:



The available structural materials cannot withstand the expected loads in a thermonuclear reactor, therefore, the wall of the reactor vacuum chamber should be protected from the particles and energy flows. Tungsten is the most studied, widespread and promising material for the protective cladding of thermonuclear installations. The undoubted advantages of tungsten are its high temperature resistance and low activation under neutron irradiation. The main disadvantage of tungsten as a material of fusion reactor is its fragility at temperatures below 200–400 °C. After neutron irradiation the temperature of the ductile-to-brittle transition rises to 700 °C and higher, therefore, the tungsten cladding may become brittle at operating conditions in a fusion reactor. Also at elevated temperatures in contact with oxygen, tungsten intensively oxidizes. Therefore, after water or atmosphere breakthrough into the chamber of a work-

ing reactor large-scale repairs may be required. For use in industrial fusion reactors, it is desirable to get rid of the disadvantages of tungsten, while preserving the advantages of this material. This review is devoted to the efforts of the global fusion community to optimize the properties of tungsten.

The work was carried out within the framework of the scientific program of the National Center for Physics and Mathematics, direction No. 8 «Physics of hydrogen isotopes».

Максимкин Игорь Петрович
ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»
Начальник отдела
607188, г. Саров Нижегородской обл.,
пр-т Мира, д. 37

Maksimkin I. P.
RFNC-VNIIEF
Head of Department
607188, 37, Mira av., Sarov,
Nizhny Novgorod region, Russia
arkad@triton.vniief.ru



ВЛИЯНИЕ ВОДОРОДА НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СТАЛИ 316L И СПЛАВА INCONEL 718, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ПОСЛОЙНОГО ЛАЗЕРНОГО СПЛАВЛЕНИЯ

*И. П. Максимкин¹, А. А. Юхимчук¹, И. Л. Малков¹, И. Е. Бойцов¹,
В. В. Балухев¹, Е. В. Шевнин¹, С. В. Шотин², В. Н. Чувильдеев²,
М. Ю. Грязнов²*

¹Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики, г. Саров
²НИФТИ Нижегородского государственного университета им. Н. И. Лобачевского

Металлические материалы, получаемые с использованием аддитивных технологий, рассматриваются как новый класс конструкционных материалов, а сама технология – как новый перспективный способ конструирования металлических изделий сложной формы для перспективных приложений в различных областях науки и техники. Исследования материалов, полученных аддитивными методами, ведутся очень активно и к настоящему времени подробно изучено влияние режимов сплавления на плотность, структуру и физико-механические свойства различных материалов. Активно изучается их коррозионная стойкость, деформационное поведение при повышенных температурах, сопротивление усталостному разрушению и др.

Одними из наиболее распространенных материалов, применяемых в настоящее время в аддитивных технологиях, являются нержавеющая сталь 316L и жаропрочный никелевый сплав Inconel 718. Механические свойства нержавеющей стали 316L и сплава Inconel 718, полученных методом послойного лазерного сплавления (ПЛС), в настоящее время хорошо изучены. Вместе с тем, в научной литературе отсутствует информация об исследованиях процессов взаимодействия таких материалов с водородом, а также о влиянии водорода на их механические свойства. Результаты исследования взаимодействия водорода с материалами, полученными методом ПЛС, представляют интерес для создания оборудования, работающего в водородосодержащих средах, в частности, сосудов высокого давления.

В рамках настоящей работы выполнено исследование влияния водорода на механические свойства рассматриваемых материалов в диапазоне температур до 600 °С при давлении водорода 80 МПа. Показано, что водород не оказал существенного влияния на прочностные свойства ПЛС-материалов. Характеристики пластичности стали 316L не чувствительны к воздействию водорода в интервале температур от комнатной до плюс 500 °С. Только при температуре 600 °С относительное сужение после разрыва в водороде заметно уменьшилось – на 25 %, тем не менее осталось на достаточно высоком уровне. С ростом температуры испытания наблюдается снижение пластичности сплава в среде водорода – в интервале температур от плюс 100 °С до плюс 500 °С снижение характеристик составило от 25 до 37 %, а при 600 °С это снижение максимально: 57 %.

Полученные результаты показывают, что изменение механических свойств рассматриваемых ПЛС – материалов под воздействие водорода, практически такое же, как и у материалов, полученных по традиционным технологиям.

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

EFFECT OF HYDROGEN ON MECHANICAL PROPERTIES OF 316L STEEL AND INCONEL 718 ALLOY, OBTAINED BY SELECTIVE LASER MELTING METHOD.

*I. P. Maksimkin¹, A. A. Yukhimchuk¹, I. L. Malkov¹, I. E. Boytsov¹,
V. V. Baluev¹, E. V. Shevnin¹, S. V. Shotin², V. N. Chuvildeev²,
M. Yu. Gryaznov²*

¹Russian Federal Nuclear Center – All-Russian Research Institute
of Experimental Physics, Sarov

²NIFTI UNN named after N. I. Lobachevsky, Nizhny Novgorod

Metal materials produced using additive technologies are considered as a new class of structural materials, and the technology itself is considered as a new promising way to design complex metal products for promising applications in various fields of science and technology. Studies of materials produced by additive methods are actively carried out and by now the influence of melting modes on the density, structure and physical and mechanical properties of various materials has been studied in detail. Their corrosion resistance, deformation behavior at higher temperatures, fatigue resistance, etc. are actively studied.

Some of the most common materials currently used in additive technologies are stainless steel 316L and heat-resistant nickel alloy Inconel 718. Mechanical properties of stainless steel 316L and Inconel 718 alloy, obtained by layer-by-layer laser melting are now well understood. At the same time, there is no information in the scientific literature on studies of the interaction processes of such materials with hydrogen, as well as on the effect of hydrogen on their mechanical properties. The results of the study of the interaction of hydrogen with materials obtained by layer-by-layer laser melting are of interest for the creation of equipment operating in the hydrogen-containing media, in particular, high-pressure vessels.

Within the framework of this work, a study of the effect of hydrogen on the mechanical properties of the materials under consideration in the temperature range up to 600 °C at hydrogen pressure 80 MPa was carried out. It was shown that hydrogen did not significantly affect the strength properties of materials obtained by layer-by-layer laser melting. Ductility characteristics of 316L steel are not sensitive to hydrogen in the temperature range from room temperature to 500 °C. Only at the temperature 600 °C the reduction area after the rupture in hydrogen was noticeably reduced – by 25 %, nevertheless, it remained at

a fairly high level. With increasing the test temperature, we can observe the decrease of the alloy ductility in the hydrogen medium – in the temperature range from plus 100 °C to plus 500 °C the decrease in characteristics was from 25 to 37 %, and at 600 °C this decrease is maximum: 57 %.

The results show that the change of mechanical properties of the considered materials obtained by layer-by-layer laser melting under the influence of hydrogen almost the same as materials obtained using by traditional technologies.

The study was carried out within the framework of the scientific program of the National Center for Physics and Mathematics, project № 8 «Physics of Hydrogen Isotopes».

Бойцов Игорь Евгеньевич
ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»
Старший научный сотрудник
607188, г. Саров Нижегородской обл.,
пр-т Мира, д. 37

Boytsov I. E.
RFNC-VNIIEF
Senior researcher
607188, 37, Mira av., Sarov,
Nizhny Novgorod region, Russia

arkad@triton.vniief.ru



ВЛИЯНИЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ ВОДОРОДА НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТИТАНОВОГО СПЛАВА ВТ6, ПОЛУЧЕННОГО МЕТОДОМ ПОСЛОЙНОГО ЛАЗЕРНОГО СПЛАВЛЕНИЯ

*И. Е. Бойцов¹, А. В. Бучирин¹, И. П. Максимкин¹, Е. В. Шевнин¹,
А. А. Юхимчук¹, М. Ю. Грязнов², В. Н. Чувильдеев²*

¹Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики, г. Саров
²НИФТИ ННГУ им. Лобачевского, г. Нижний Новгород

Исследовано влияние воздействия газообразного водорода на характеристики механических свойств титанового сплава ВТ6, полученного методом послойного лазерного сплавления (ПЛС). Приведены результаты испытаний на растяжение ПЛС-образцов, как в среде водорода, так и в инертной среде при давлении 80 МПа в интервале температур 20–600 °С. Показано, что ПЛС-сплав ВТ6 устойчив в среде водорода при давлении 80 МПа и температуре 600 °С в течение времени до пяти часов.

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

EFFECT OF HYDROGEN EXPOSURE ON MECHANICAL PROPERTIES OF BT6 TITANIUM ALLOY OBTAINED BY SELECTIVE LASER MELTING METHOD

*I. E. Boytsov¹, A. V. Buchirin¹, I. P. Maksimkin¹, E. V. Shevnin¹,
A. A. Yukhimchuk¹, M. Yu. Gryaznov², V. N. Chuvildeev²*

¹Russian Federal Nuclear Center – All-Russian Research Institute
of Experimental Physics, Sarov

²NIFTI UNN named after N. I. Lobachevsky, Nizhny Novgorod

The effect of gaseous hydrogen exposure on the characteristics of mechanical properties of BT6 titanium alloy obtained by layer-by-layer laser melting has been investigated. The results of tensile tests of layer-by-layer laser melting samples both in the hydrogen and inert medium at a pressure of 80 MPa in the temperature range 20–600 °C are given. It is shown that the BT6 alloy obtained by layer-by-layer laser melting is stable in the hydrogen medium at a pressure of 80 MPa and temperature 600 °C for up to five hours.

The study was carried out within the framework of the scientific program of the National Center for Physics and Mathematics, project № 8 «Physics of Hydrogen Isotopes».

Малков Игорь Леонардович
ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»
Старший научный сотрудник
607188, г. Саров Нижегородской обл.,
пр-т Мира, д. 37

Malkov I. L.
RFNC-VNIIEF
Senior researcher
607188, 37, Mira av., Sarov,
Nizhny Novgorod region, Russia

arkad@triton.vniief.ru



ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ КОНСТРУКЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ, ИЗГОТОВЛЕННЫХ МЕТОДОМ ПОСЛОЙНОГО ЛАЗЕРНОГО СПЛАВЛЕНИЯ, ПОСЛЕ ИСПЫТАНИЙ В СРЕДЕ ВОДОРОДА

И. Л. Малков

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

В настоящее время наиболее распространенный вид аддитивных технологий при производстве изделий сложной формы является метод послойного лазерного сплавления (ПЛС). Информация о влиянии водорода на свойства конструкционных материалов (КМ), изготовленных с помощью ПЛС, представляет интерес для создания оборудования, работающего в водородосодержащих средах.

В настоящей работе приведены результаты исследования структуры четырех КМ (сталь 316L, сплав Inconel 718, титановый сплав ВТ6, сталь ВНЛ14) до и после кратковременных испытаний на растяжения в среде водорода высокого давления в диапазоне температур от комнатной до 873 К, длительных (до сотен часов) испытаний по определению водородопроницаемости при температурах от 673 до 873 К, наводороживания в этом же диапазоне температур при давлении 40 МПа в течение до 40 часов.

Показано, что в исходном состоянии в результате быстрых нагревов и охлаждений при ПЛС КМ имеют иерархическую структуру, которую следует анализировать на макро-, мезо- и микроуровнях. Влияние водорода на структуру КМ не установлено. Так изменение структуры стали 316L происходило либо при длительных выдержках при температурах до 873 К, либо во время отжига при 1348 К. В результате гомогенизирующего отжига структура стали 316L стала практически идентичной структуре аустенитных нержавеющей сталей, изготовленных по традиционной технологии.

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

STUDY OF THE STRUCTURAL MATERIALS PRODUCED BY SELECTIVE LASER MELTING METHOD

I. L. Malkov

Russian Federal Nuclear Center – All-Russian Research Institute
of Experimental Physics, Sarov

Currently the most common type of additive technologies in the production of complex-shaped products is the layer-by-layer laser melting method. Information on the influence of hydrogen on the properties of structural materials (SM) produced by layer-by-layer laser melting method is of interest for creation of the equipment operating in the hydrogen-containing media.

This paper presents the results of a study of four SM structure (steel 316L, alloy Inconel 718, titanium alloy BT6, steel ВНЛ14) before and after short-term tensile tests in high-pressure hydrogen medium in the temperature range from room temperature to 873 K, long-term (up to hundreds of hours) tests to determine hydrogen permeability at temperatures from 673 to 873 K, hydrogen uptake in the same temperature range at a pressure of 40 MPa for up to 40 hours.

It was shown that in the initial state, as a result of rapid heating and cooling during layer-by-layer laser melting, the structural materials have hierarchical structure, which should be analyzed at macro-, meso-, and micro-levels. The impact of hydrogen on the SM structure has not been established. Thus, the

change in 316L steel structure occurred either during long-term holding at temperatures up to 873 K, or during annealing at 1348 K. As a result of homogeneous annealing, the structure of 316L steel became almost identical to the structure of austenitic stainless steels made according to the traditional technology.

The study was carried out within the framework of the scientific program of the National Center for Physics and Mathematics, project № 8 «Physics of Hydrogen Isotopes».

Секция 3

A10–A11, B10–B11, C9–C14

ГИДРИДЫ И ГИДРИДНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ

Session 3

**HYDRIDES AND HYDRIDE
TRANSFORMATIONS**

Денисов Евгений Александрович
Санкт-Петербургский государственный
университет

Доцент
199034, Россия, Санкт-Петербург,
Университетская набережная, д. 7–9
Исследования в области взаимодействия
водорода с металлами, неметаллическими
защитными покрытиями, углеродными
материалами (в т. ч. наноструктурированными)

Denisov Evgeny
Saint Petersburg State University
Assistant professor
7–9 Universitetskaya Embankment,
St Petersburg, Russia, 199034
Research in the field of interaction of hydrogen with
metals, non-metallic protective coatings, carbon
materials (including nanostructured ones)

e.denisov@spbu.ru



МЕТОД ВОДОРОДОПРОНИЦАЕМОСТИ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПРЕДЕЛЬНОЙ РАСТВОРИМОСТИ ВОДОРОДА В ГАФНИИ

Е. А. Денисов, Е. П. Громов, В. А. Дмитриев, А. А. Селиванов

Санкт-Петербургский государственный университет

Водородное охрупчивание конструкционных материалов посредством механизма гидридообразования является достаточно распространенным явлением. К материалам, склонным к образованию хрупкой гидридной фазы при их контакте с водородосодержащими средами, относятся такие незаменимые в технике металлы, как титан, цирконий, ванадий, тантал и их сплавы. Именно этим вызван интерес к проблеме определения условий, при которых происходит фазовый переход между твердым раствором водорода и гидридом металла.

Работа демонстрирует на примере гафния возможности новой предлагаемой авторами методики [1], основанной на методе водородопроницаемости. Она позволяет определить предельную растворимость водорода

в металле, при которой начинается образование его гидрида (terminal solid solubility for precipitation – C_{tssp}) по кинетике проникающего через образец потока водорода в процессе фазовых превращений. Основными достоинствами методики является относительная простота, наглядность получаемых результатов и возможность определения C_{tssp} при постоянной температуре.

В работе обнаружено, что величина предельной растворимости существенно зависит от скорости роста концентрации в образце. Предложен подход, при котором поверхностно-лимитированный режим проникновения обеспечивается на всем протяжении эксперимента за счет постоянного контроля и регулировки входного потока, в отличие от традиционного подхода, при котором постоянным поддерживается давление на входной стороне. Определена температурная зависимость предельной растворимости водорода в гафнии в интервале 350–550 °С. Проведено сравнение полученных результатов с литературными данными. Сделан вывод о работоспособности методики, адекватности получаемых с ее помощью результатов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-29-00625, <https://rscf.ru/project/24-29-00625/>.

ЛИТЕРАТУРА

1. E. A. Denisov, V. A. Dmitriev (2024). Manifestation of Hydride Phase Transformations in the Hydrogen Permeability of Polycrystalline Titanium and Zirconium. *Crystallography Reports*, 69(1), 45–52.

HYDROGEN PERMEABILITY METHOD FOR DETERMINING THE TERMINAL SOLID SOLUBILITY OF HYDROGEN IN HAFNIUM

E. A. Denisov, E. P. Gromov, V. A. Dmitriev, A. A. Selivanov

Saint-Petersburg State University

Hydrogen embrittlement of structural materials by the mechanism of hydride formation is a very common phenomenon. Materials prone to the formation of a brittle hydride phase in contact with hydrogen-containing media include such metals indispensable in technology as titanium, zirconium, vana-

dium, tantalum and their alloys. That is why there is so much interest in the problem of determining the conditions under which a phase transition occurs between a solid solution of hydrogen and a metal hydride.

Using hafnium as an example, the paper demonstrates the possibilities of a new technique proposed by the authors [1] based on the method of hydrogen permeability. This allows us to determine the terminal solid solubility of hydrogen in a metal, at which the formation of its hydride begins (C_{tssp}), by the kinetics of the hydrogen flow penetrating through the sample during phase transformations. The main advantages of the technique are the relative simplicity, clarity of the results obtained and the ability to determine C_{tssp} at a constant temperature.

It was found that the value of the terminal solubility significantly depends on the rate of concentration growth in the sample. An approach is proposed in which a surface limited permeation mode is provided throughout the experiment due to constant monitoring and adjustment of the inlet flow, in contrast to the traditional approach, in which the pressure on the inlet side is maintained constant. The temperature dependence of the terminal solubility of hydrogen in hafnium in the range 350–550 °C is determined. The results obtained are compared with the literature data. The conclusion is made about the effectiveness of the technique, the adequacy of the results obtained with its help.

This study was supported by the Russian Science Foundation (project no. 24-29-00625, <https://rscf.ru/project/24-29-00625/>).

REFERENCES

1. E. A. Denisov, V. A. Dmitriev (2024). Manifestation of Hydride Phase Transformations in the Hydrogen Permeability of Polycrystalline Titanium and Zirconium. *Crystallography Reports*, 69(1), 45–52.

Нецкина Ольга Владимировна

Институт катализа им. Г. К. Борескова СО РАН
Заведующий отделом материаловедения
и функциональных материалов, Руководитель
НТК по синтезу и исследованию гидридов
630090, г. Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, д. 5
Область научных интересов: синтез и каталити-
ческие превращения гидридных соединений

Netskina Olga

Boreskov Institute of Catalysis SB RAS
Head of the Department of Materials Science
and Functional Materials
Head of scientific workforce on the synthesis
and investigation of hydrides, Leading Researcher
630090, Novosibirsk, Lavrentiev Ave. 5
Fields of interest: synthesis and catalytic conversions
of hydrides

E-mail: netskina@catalysis.ru

**ГИДРИДНЫЕ ИСТОЧНИКИ ВОДОРОДА И ОБЛАСТИ
ИХ ПРИМЕНЕНИЯ**

О. В. Нецкина

Институт катализа им. Г. К. Борескова СО РАН, Новосибирск

Интерес к компактным форм хранения водорода стал возрастать в связи с наметившейся тенденцией перехода с традиционных видов энергоносителей на водород [1]. Поскольку это низкоплотный газ с высокой агрессивностью по отношению к различным материалам, то его аккумулярование в химически связанном состоянии открывает перспективы создания водородных накопителей с высокой емкостью [2]. В этом случае, предпочтение отдается твердофазным формам хранения водорода, и прежде всего, гидридным соединениям [3]. При выборе гидрида для конкретной области применения учитывается его стабильность и возможность организации процесса с минимальной затратой энергии. Анализ литературы показал, что газогенерация может осуществляться двумя способами – термическим разложением [4] и гидролизом [5]. Последний ва-

риант предполагает также вовлечение воды в процесс получения водорода и сопровождается выделением тепла, что позволяет создать водородгенерирующие системы для Арктической зоны. Тем не менее, для их безопасной эксплуатации следует выбрать гидрид с приемлемым тепловым эффектом. Таким соединением является боргидрид натрия, но для его полной конверсии требуются катализаторы [6]. Наряду с их разработкой решаются вопросы и создание конструкции газогенератора, где определенного успеха достигли корейские и испанские исследователи при создании источника энергии на основе топливного элемента с протонообменной мембраной для беспилотного летательного аппарата [7, 8].

Широкий спектр гидридных соединений (MgH_2 , $LiAlH_4$, NH_3BH_3 и др.) рассматривается и как источники водорода, обеспечивающие его генерацию при относительно умеренном нагреве (80–250 °C). Для снижения температуры разложения гидрида варьируют дисперсность гидрида, дефектность кристаллической решетки, вводят добавки, выполняющие роль центров адсорбции/десорбции и спилловера водорода [9]. Кроме того, развитие техники гидридного синтеза позволяет предложить новые химические соединения, например, этилендиамин(бис)боран [10], который в присутствии платинового катализатора может генерировать водород уже при комнатной температуре [11].

Таким образом, выбор гидридных источников водорода весьма широк и определяется областями и условиями их применения.

Финансирование – проект государственного задания FWUR-2024-0034.

ЛИТЕРАТУРА

1. R. Y. Sathe et al. *Int. J. Hydrog. Energy*. 48 (2023) 12767.
2. G. Şenol et al. *Int. J. Hydrog. Energy*. 68 (2024) 1178.
3. P. Wang, X. Rang *Dalton Trans.* 40(2008) 5400.
4. T.-T. Le et al. *Chem. Eng. J.* 473 (2023) 145315.
5. L. Ouyang et al. *J. Alloys Compd.* 910 (2022) 164831.
6. Q. Yao et al. *Inorg. Chem. Front.* 7 (2020) 3837.
7. J. Kim, T. Kim. *Energy Procedia*. 61 (2014) 1992.
8. N. Lapeña-Rey et al. *Int. J. Hydrog. Energy*. 42 (2017) 6926.
9. T. J. Frankcombe. *Chem. Rev.* 112 (2012) 2164.
10. S. Sahler et al. *Int. J. Hydrog. Energy*. 38 (2013) 3283.
11. G. Zhang et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* 60 (2021) 11725.

HYDRIDE HYDROGEN SOURCES AND THEIR APPLICATIONS

O. V. Netskina

Boreskov Institute of Catalysis SB RAS, Novosibirsk

The interest in compact forms of hydrogen storage solutions has been steadily increasing due to the emerging trend of transitioning conventional energy sources to hydrogen [1]. Hydrogen, being a low-density gas with high aggressiveness towards various materials, presents challenges for storage. However, the possibility of hydrogen accumulation in a chemically bound state opens up prospects for creating high-capacity hydrogen storage systems [2]. In this context, solid-state forms of hydrogen storage, particularly hydride compounds, are preferred [3]. When choosing a hydride for a specific application, factors such as stability and the potential for organizing the process with minimal energy consumption are taken into account. Literature analysis reveals two methods for hydrogen generation – thermal decomposition [4] and hydrolysis [5]. Hydrolysis involves the participation of water in the hydrogen production process and is accompanied by the release of heat, making it suitable for creating hydrogen-generating systems for the Arctic zone. However, ensuring the safe operation of such systems requires the selection of a hydride with an acceptable thermal effect. Sodium borohydride is one such compound, although catalysts are necessary for its complete conversion [6]. Along with catalyst development, efforts are being made to address the design of gas generators. Some progress has been achieved by Korean and Spanish researchers in creating an energy source based on a fuel cell with a proton exchange membrane for an unmanned aerial vehicle [7, 8].

A wide range of hydride compounds (MgH_2 , LiAlH_4 , NH_3BH_3 , etc.) are considered as sources of hydrogen, providing its generation at relatively moderate heating (80–250 °C). To reduce the decomposition temperature of the hydride, various approaches are employed, including adjusting the dispersity of the hydride, modifying the defectiveness of the crystal lattice, and introducing additives that act as centers for hydrogen adsorption/desorption and hydrogen spillover [9]. Furthermore, advancements in hydride synthesis techniques have led to the development of new chemical compounds, such as ethylenediamineborane [10], which, in the presence of a platinum catalyst, can generate hydrogen at room temperature [11].

Therefore, the choice of hydrogen hydride sources is extensive and is determined by the specific areas and conditions of their application.

This work was supported by project FWUR-2024-0034.

REFERENCES

1. R. Y. Sathe et al. *Int. J. Hydrog. Energy*. 48 (2023) 12767.
2. G. Şenol et al. *Int. J. Hydrog. Energy*. 68 (2024) 1178.
3. P. Wang, X. Rang *Dalton Trans.* 40(2008) 5400.
4. T.-T. Le et al. *Chem. Eng. J.* 473 (2023) 145315.
5. L. Ouyang et al. *J. Alloys Compd.* 910 (2022) 164831.
6. Q. Yao et al. *Inorg. Chem. Front.* 7 (2020) 3837.
7. J. Kim, T. Kim. *Energy Procedia*. 61 (2014) 1992.
8. N. Lapeña-Rey et al. *Int. J. Hydrog. Energy*. 42 (2017) 6926.
9. T. J. Frankcombe. *Chem. Rev.* 112 (2012) 2164.
10. S. Sahler et al. *Int. J. Hydrog. Energy*. 38 (2013) 3283.
11. G. Zhang et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* 60 (2021) 11725.

Голубков Александр Николаевич
ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»
Ведущий научный сотрудник
607188, г. Саров Нижегородской обл.,
пр-т Мира, д. 37

Golubkov Alexander Nikolaevich
RFNC-VNIIEF
Leading Researcher
607188, 37, Mira av., Sarov,
Nizhny Novgorod region, Russia

arkad@triton.vniief.ru



ИССЛЕДОВАНИЕ P-T-C СООТНОШЕНИЙ ДЛЯ ГИДРИДА И ДЕЙТЕРИДА ТИТАНА В ОБЛАСТИ ДАВЛЕНИЙ ДО 300 МПа И ТЕМПЕРАТУР ДО 978 К

А. Н. Голубков

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

Проведено измерение равновесных давлений десорбции H_2 и D_2 в системах Ti-H и Ti-D. Работы проводились в температурном диапазоне от 594 К до 978 К, область изменения давлений H_2 или D_2 над соответствующими гидридами составляла от 0,07 до 297 МПа. На основании анализа полученных изотерм определены границы раздела между β , ($\beta+\delta$) и δ фазами. Установлено, что положения границ фазовых переходов между β и ($\beta+\delta$) фазами и между ($\beta+\delta$) и δ фазами для систем Ti-H и Ti-D совпадают не полностью. Для системы Ti-D эти границы сдвинут в область больших концентраций водорода по сравнению с системой Ti-H на, примерно, а.о. $D/Ti = 0,05$.

На основе полученных P-T-C соотношений и имеющихся литературных данных построены зависимости теплоты диссоциации гидрида и дейтерида титана от содержания водорода.

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

**STUDY OF P-T-C RATIOS FOR TITANIUM HYDRIDE
AND DEUTERIDE IN THE PRESSURE RANGE UP TO 300 MPa
AND TEMPERATURES UP TO 978 K**

A. N. Golubkov

Russian Federal Nuclear Center – All-Russian Research Institute
of Experimental Physics, Sarov

Equilibrium pressures of H₂ and D₂ desorption were measured in Ti-H and Ti-D systems. The work was carried out in the temperature range from 594 K to 978 K, the pressure range of H₂ and D₂ over the corresponding hydrides was from 0,07 to 297 MPa. Based on the analysis of the obtained isotherms, the interfaces between β , ($\beta+\delta$) and δ phases were determined. It was found that the positions of the boundaries of the phase transitions between β and ($\beta+\delta$) phases and between ($\beta+\delta$) and δ phases for Ti-H and Ti-D systems do not completely coincide. For the Ti-D system, these boundaries are shifted to the area of higher concentrations of hydrogen compared to the Ti-H system by about a.o. D/Ti = 0,05.

Based on the obtained P-T-C ratios and available literature data, dependences of dissociation heat of titanium hydride and deuteride on hydrogen content were plotted.

The study was carried out within the framework of the scientific program of the National Center for Physics and Mathematics, project № 8 «Physics of Hydrogen Isotopes».

Савотин Иван Михайлович
МГУ им. М. В. Ломоносова
Аспирант 4 г/о
79166550606@mail.ru
Сплавы для хранения водорода,
мембранное газоразделение
E-mail: 79166550606@mail.ru



**ОСОБЕННОСТИ ГИДРИДООБРАЗОВАНИЯ
ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ СПЛАВОВ СИСТЕМЫ
TI-ZR-V-NB-TA-HF**

И. М. Савотин¹, Е. А. Бердоносова¹, С. Н. Клямкин¹, А. А. Король²

¹Московский Государственный Университет им. М. В. Ломоносова,
Химический факультет, Ленинские горы, д. 1, стр. 3, Москва,
119991 Россия

²Национальный исследовательский технологический университет
«МИСИС», Ленинский проспект 4, 119049, Москва, Россия

В настоящее время водородные технологии получают широкое развитие по всему миру благодаря тому, что с их помощью можно решить наиболее острые, глобальные проблемы, в том числе энергетические и экологические. Водород считается одним из наиболее экологичных и перспективных видов топлива с высокой энергетической емкостью. Для широкого применения водорода в транспорте, химической технологии и энергетике необходимо решить множество проблем, в том числе выделение водорода из газовых смесей, компактное хранение и переработка для производства энергии.

Одним из способов решения данных проблем является использование высокоэнтропийных сплавов (ВЭС), образованных 5 или более металлами с концентрациями, близкими к эквипомным. Данные сплавы обладают высокой водородсорбционной емкостью (до 2,5 Н/М), а также являются

перспективными мембранными материалами за счет присутствия в их составе металлов 5 группы с высокой водородной проницаемостью.

Самым простым и наиболее распространенным методом синтеза ВЭС является дуговая плавка, но материалы, полученные таким образом, имеют окисленную поверхность, которая препятствует взаимодействию с водородом и делает необходимым применение предварительной высокотемпературной (573–973 К) активационной обработки [1], что является неприемлемым для применения в системах хранения и очистки водорода сорбционного типа, а также в металл-полимерных мембранах для выделения водорода.

В настоящей работе были исследованы водородсорбционные свойства сплавов системы Ti–Zr–V–Nb–Ta–Hf, полученных тремя разными методами: в виде порошков при механохимическом синтезе, в виде компактных слитков при электродуговой плавке, а также в виде микроразмерных волокон, полученных методом электролучевой плавки с капельной экстракцией расплава [2].

Установлено, что оптимальным способом получения является электролучевая плавка с капельной экстракцией расплава, обеспечивающая получение однофазных материалов с высокой водородсорбционной емкостью. Изучение процессов гидридообразования проводили на установке типа Сиверта, совмещенной с калориметром Тиана-Кальве.

Палладиевые покрытия позволили исключить стадию высокотемпературной активирующей обработки и провести полное гидрирование при комнатной температуре. Проведено изучение промежуточных продуктов реакции гидридообразования, определены стадии образования твердого раствора водорода, моногидридной и дигидридной фаз. С помощью термодимических методов анализа впервые проведена оценка зависимости энтальпии гидрирования от концентрации водорода в сплаве.

ЛИТЕРАТУРА

1. Sow M. A. Ek G., Couzinié J. P., Perrière L., Guillot I., Bourgon J., Møller K. T., Jensen T. R., Akiba E., Sahlberg M. Hydrogen sorption in Ti–Zr–Nb–Hf–Ta high entropy alloy. *J Alloys Compd* 2019;775:667-74.
2. Zadorozhnyy V., Tomilin I., Berdonosova E., Gammer C., Zadorozhnyy M., Savvotin I., Shchetinin I., Zheleznyi M., Novikov A., Bazlov A., Serov M., Milovzorov G., Korol A., Kato H., Eckert J., Kaloshkin S., Klyamkin S. Composition design, synthesis and hydrogen storage ability of multi-principal-component alloy Ti–V–Zr–Nb–Ta. *J Alloys Compd* 2022;901:163638.

Терёшина Ирина Семеновна
МГУ им. М. В. Ломоносова
Ведущий научный сотрудник
Россия, Москва, Ленинские горы, 1
Физический факультет
кафедра Физики твердого тела

Tereshina Irina
Lomonosov Moscow State University
Leading Researcher
Russia, Moscow, Leninskye gory, 1,
Faculty of Physics
Department of Solid State Physics
tereshina@physics.msu.ru



МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ГИДРИДОВ ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ В СЛАБЫХ, СИЛЬНЫХ И СВЕРХСИЛЬНЫХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ

И. С. Терёшина

МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва

Одна из важнейших задач современной физики магнитных явлений состоит в создании научных основ магнитного материаловедения и получения новых материалов с заранее заданными свойствами. Успехи, достигнутые в этом направлении, связаны, в значительной степени, с исследованиями редкоземельных (РЗ) интерметаллических соединений (ИМС), которые широко известны в науке и технике благодаря своим уникальным магнитным свойствам. Исследования ИМС, как правило, проводятся с применением слабых, сильных и сверхсильных магнитных полей.

Среди РЗ ИМС существуют материалы пригодные для использования в качестве магнитотвердых (МТМ). С экономической точки зрения наибольший интерес представляют сплавы, в которых в качестве 3d-переходного металла используется железо. Двойные интерметаллиды с высоким содержанием железа R_2Fe_{17} обладают низкими температурами Кюри, поэтому длительное время в промышленности применялись РЗ ИМС на основе кобальта. Получение МТМ на основе $Nd_2Fe_{14}V$ показало, что тройные интерметаллиды могут обладать свойствами, необходимыми для

использования их в качестве постоянных магнитов. При этом было установлено положительное влияние гидрирования на магнитные свойства соединений $R_2Fe_{14}B$. Водородная обработка магнитов позволяла увеличить коэрцитивную силу с помощью процессов, известных в литературе, как HDDR - по начальным буквам процессов гидрирования, диспропорционирования, десорбции и рекомбинации.

В последние годы резко возрос интерес к исследованию магнетизма соединений $R_2Fe_{14}B$, R_2Fe_{17} , а также $R(Fe,T)_{12}$ (где $T = Ti, V$ и др.) в сильных полях. Известно, что эти соединения активно взаимодействуют с водородом, образуя твердые растворы внедрения. В соединениях $R_2Fe_{14}B$, R_2Fe_{17} и $R(Fe,T)_{12}$ введение водорода приводит к возрастанию температуры Кюри. Физические механизмы, ответственные за изменение T_C , определяются сразу несколькими факторами.

Еще одна важнейшая характеристика ИМС – магнитокристаллическая анизотропия (МКА) – также сильно меняется при внедрении атомов водорода. Наиболее достоверные данные о МКА и спин – переориентационных переходах (СПП) можно получить на монокристаллах. Получение монокристаллов гидридов без разрушения – как показали наши исследования – это вполне осуществимая на практике задача. Экспериментальные результаты, полученные с использованием монокристаллов и выявленные при этом физические закономерности важны для выяснения природы формирования уникальных фундаментальных свойств РЗ магнитных материалов с атомами внедрения и создания новые магнитные материалы с требуемыми характеристиками, способными стабильно работать в водородсодержащих средах.

В докладе будут рассмотрены:

- основные методы получения ИМС с атомами внедрения (водородом) в различном структурном состоянии, в том числе, в виде монокристаллов;
- экспериментальные исследования их магнитных свойств в слабых, сильных и сверхсильных магнитных полях с целью установления основных закономерностей поведения МКА, спонтанных и индуцированных магнитным полем СПП, построение магнитных фазовых диаграмм;
- роль обменных и магнитокристаллических взаимодействий в формировании магнитных свойств соединений с атомами внедрения;
- новые водородсодержащие соединения, которые могли бы представлять интерес не только для разработки на их основе материалов для постоянных магнитов, но и для датчиков различного назначения, благодаря спин – переориентационным фазовым переходам.

MAGNETIC PROPERTIES OF HYDRIDES OF INTERMETALLIC COMPOUNDS IN WEAK, HIGH AND ULTRAHIGH MAGNETIC FIELDS

I. S. Tereshina

Lomonosov Moscow State University, Moscow

One of the most important tasks of modern physics of magnetic phenomena is to create the scientific foundations of magnetic materials science and obtain new materials with predetermined properties. The successes achieved in this direction are associated, to a large extent, with the research of rare earth (RE) intermetallic compounds (IMCs), which are widely known in science and technology due to their unique magnetic properties. IMC research is usually carried out using weak, high and ultra-high magnetic fields.

Among RE IMCs, there are materials suitable for use as hard magnetic materials (HMM). From an economic point of view, alloys in which iron is used as a 3d-transition metal are of greatest interest. Double intermetallic compounds with a high iron content R_2Fe_{17} have low Curie temperatures; therefore, cobalt-based RE IMCs have been used in industry for a long time. The preparation of HMM based on $Nd_2Fe_{14}B$ showed that ternary intermetallic compounds may have the properties necessary for their use as permanent magnets. At the same time, the positive effect of hydrogenation on the magnetic properties of $R_2Fe_{14}B$ compounds was established. Hydrogen treatment of magnets made it possible to increase the coercive force using processes known in the literature as HDDR – after the initial letters of the processes of hydrogenation, disproportionation, desorption and recombination.

In recent years, interest in the study of the magnetism of compounds $R_2Fe_{14}B$, R_2Fe_{17} , as well as $R(Fe,T)_{12}$ (where $T = Ti, V, \text{ etc.}$) in high magnetic fields has sharply increased. It is known that these compounds actively interact with hydrogen, forming interstitial solid solutions. In the compounds $R_2Fe_{14}B$, R_2Fe_{17} and $R(Fe,T)_{12}$, the introduction of hydrogen leads to an increase in the Curie temperature. The physical mechanisms responsible for changes in the vehicle are determined by several factors at once.

Another important characteristic of an IMC, magnetocrystalline anisotropy (MCA), also changes greatly with the introduction of hydrogen atoms. The most reliable data on MCA and spin-reorientation transitions (SRTs) can be obtained on single crystals. Obtaining single crystals of hydrides without destruction, as our research has shown, is a completely feasible task in practice.

Experimental results obtained using single crystals and the physical regularities identified are important for elucidating the nature of the formation of unique fundamental properties of rare earth magnetic materials with interstitial atoms and creating new magnetic materials with the required characteristics that can operate stably in hydrogen-containing environments.

The report will cover:

- basic methods for producing IMCs with interstitial atoms (hydrogen) in various structural states, including in the form of single crystals;
- experimental study of their magnetic properties in weak, high and ultra-high magnetic fields in order to establish the basic patterns of behavior of small spacecraft, spontaneous and magnetic field-induced SPPs, construction of magnetic phase diagrams;
- the role of exchange and magnetocrystalline interactions in the formation of the magnetic properties of compounds with interstitial atoms;
- new hydrogen-containing compounds that could be of interest not only for the development of materials for permanent magnets based on them, but also for sensors for various purposes due to spin-reorientation phase transitions.

Анжигатова Елена Дмитриевна

Томский политехнический университет

Инженер ИЯТШ

г. Томск, пр. Ленина, 43

Область научных интересов: взаимодействие
водорода с материалами

Anzhigatova Elena

Tomsk Polytechnic University

Engineer

Tomsk, Lenina st. 43

Fields of interest: hydrogen interaction
with materials

eda5@tpu.ru



РАЗРАБОТКА СИСТЕМЫ ХРАНЕНИЯ ВОДОРОДА НА ОСНОВЕ СПЛАВА ТИТАН-ЖЕЛЕЗО С ЧАСТИЧНЫМ ЗАМЕЩЕНИЕМ ЖЕЛЕЗА НА МАРГАНЕЦ

Е. Д. Анжигатова, В. Н. Кудьяров, Р. Р. Эльман, А. М. Лидер

Томский политехнический университет

Одним из способов аккумуляирования водорода является твердофазное обратимое хранение в гидридах металлов. Некоторые металлы и сплавы взаимодействуют с водородом $Me + xH_2 = MeH_{2x}$ при условиях, близких к нормальным, при этом плотность расположения атомов водорода в кристаллической решетке может превышать плотность жидкого водорода. Использование металлгидридов превосходит по энергетической эффективности системы на основе сжатого и жидкого водорода за счет отсутствия необходимости в использовании высоких давлений (до 70 МПа) и низких температур (до 20 К) и возможности работы за счет низкопотенциальной тепловой энергии (менее 100 °С). Хранение водорода в связанном состоянии при низких давлениях (менее 1 МПа) многократно повышает безопасность систем аккумуляирования водорода, что позволяет снизить эксплуатационные расходы и требования к подготовке и квалификации обслуживающего персонала. За счет селективного поглощения водорода металлгидриды позволяют обеспечивать потребителей газом высокой

чистоты, кроме того, металлгидриды позволяют осуществлять безмашинную компрессию водорода.

В ходе работы был разработан модуль прототипа хранения водорода с металлгидридной засыпкой 1 кг формульным соотношением $\text{TiFe}_{0,85}\text{Mn}_{0,05}$ с параметрами: поток водорода оставался постоянным со скоростью 9,6 норм.л/мин в течение 64 минут, при этом максимальное давление составило 26 атм, а нормальная емкость по водороду была равна 9,6 норм.л, во время разрядки металлгидридного реактора давление водорода снижалось с 7,5 до 0 атм., а скорость потока составила 0,87 норм.л/мин в течение 82 минут. По результатам работы были определены рабочие давление и температура сплава, а также влияние примеси кислорода в водородной среде на сорбционные характеристики сплава.

DEVELOPMENT OF HYDROGEN STORAGE SYSTEM ON THE BASIS OF TITANIUM-IRON ALLOY WITH PARTIAL REPLACEMENT OF IRON BY MANGANESE

E. D. Anzhigatova, V. N. Kudiyarov, R. R. Elman, A. N. Lider

Tomsk Polytechnic University

One of the ways of hydrogen accumulation is solid-phase reversible storage in metal hydrides. Some metals and alloys interact with hydrogen $\text{Me} + x\text{H}_2 = \text{MeH}_{2x}$ under conditions close to normal, and the density of hydrogen atoms in the crystal lattice can exceed the density of liquid hydrogen. The use of metal hydrides is superior in energy efficiency to systems based on compressed and liquid hydrogen due to the absence of the need to use high pressures (up to 70 MPa) and low temperatures (up to 20 K) and the possibility of operation at the expense of low-potential heat energy (less than 100 °C). Storage of hydrogen in a bound state at low pressures (less than 1 MPa) repeatedly increases the safety of hydrogen storage systems, which allows to reduce operating costs and requirements for training and qualification of operating personnel. Due to selective hydrogen absorption metal hydrides allow to provide consumers with high purity gas, besides, metal hydrides allow to perform machine-free hydrogen compression.

In the course of work a prototype module of hydrogen storage with metal hydride filling 1 kg with formula ratio $\text{TiFe}_{0,85}\text{Mn}_{0,05}$ was developed with parameters: hydrogen flow remained constant at the rate of 9,6 normal l/min dur-

ing 64 minutes, at that the maximum pressure was 26 atm, and the normal hydrogen capacity was equal to 9,6 norm.l, during discharging of metal hydride reactor hydrogen pressure decreased from 7,5 to 0 atm, and the flow rate was 0,87 normal l/min for 82 minutes. Based on the results, the operating pressure and temperature of the alloy were determined, as well as the effect of oxygen admixture in the hydrogen environment on the sorption characteristics of the alloy.

Курганская Анастасия Александровна

МГУ им. М. В. Ломоносова

Аспирант

Россия, Москва, Ленинские горы, 1

Физика твердого тела

Kurganskaya Anastasia

Lomonosow Moscow State University

Student

Russia, Moscow, Leninskye gory, 1

Solid state physics

kurganskaia.aa17@physics.msu.ru



НОВЫЕ ВОДОРОДСОДЕРЖАЩИЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ МАГНИТНОГО ОХЛАЖДЕНИЯ В ОБЛАСТИ КРИОГЕННЫХ ТЕМПЕРАТУР

A. A. Курганская^{1,2}, Чж. Лю¹, И. С. Терёшина¹, С. В. Митрохин¹

¹МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва

²ФГБОУ ВО РГАУ-МСХА им. К. А. Тимирязева, Москва

Использование многокомпонентных соединений в качестве функциональных материалов в устройствах, работающих на водородном топливе, а также в устройствах для хранения и транспортировки водорода является перспективным направлением водородного материаловедения [1]. Средне- и высокоэнтропийные сплавы известны своей способностью выдерживать большие механические нагрузки в широком диапазоне температур, что вызывает особый интерес к свойствам их гидридов. Ранее нами были исследованы магнитные и магнитокалорические свойства соединений $(RR')Ni$ и их гидридов [2–4]. В данной работе исследуется, как гидрирование влияет на магнитные и магнитотепловые характеристики среднеэнтропийного сплава $Gd_{0,33}Dy_{0,33}Y_{0,33}Ni$. Сплав $Gd_{0,33}Dy_{0,33}Y_{0,33}Ni$ был получен в электродуговой печи из стехиометрической смеси высокочистых элементов в защитной атмосфере аргона. Его гидрид $Gd_{0,33}Dy_{0,33}Y_{0,33}NiH_3$ был получен 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-K α в диапазоне $2\theta = 10\text{--}120^\circ$ с шагом $0,0072^\circ$. 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 соединение $\text{Gd}_{0,33}\text{Dy}_{0,33}\text{Y}_{0,33}\text{Ni}$ кристаллизуется в орторомбической структуре типа FeB (пространственная группа 63, Pnma), тогда как гидрирование изменяет структурный тип на CrB (пространственная группа 62, Cmcn), увеличивая объем кристаллической определялись двумя методами: с помощью анализа кривых Белова-Аррота, а также с помощью анализа зависимости производной намагниченности от температуры. Было определено, что температура Кюри исходного образца составляет 60 К, а гидрида – 6 К. Внешнее магнитное поле сдвигает температуру Кюри на 5–6 К в сторону более высоких температур. Также было определено, что гидрирование существенно увеличивает величину МКЭ, а именно при $\mu_0\Delta H = 7$ Тл – $\Delta S_m = 10,9$ Дж/(кг $^{-1}$ К $^{-1}$) и $-\Delta S_m = 16,5$ Дж/(кг $^{-1}$ К $^{-1}$), при $\mu_0\Delta H = 5$ Тл – $\Delta S_m = 8,3$ Дж/(кг $^{-1}$ К $^{-1}$) и $-\Delta S_m = 13$ Дж/(кг $^{-1}$ К $^{-1}$) для $\text{Gd}_{0,33}\text{Dy}_{0,33}\text{Y}_{0,33}\text{Ni}$ и $\text{Gd}_{0,33}\text{Dy}_{0,33}\text{Y}_{0,33}\text{NiH}_3$ соответственно. Стоит отметить, что в исследованной нами ранее [2] псевдобинарной системе соединений $\text{Gd}_x\text{Dy}_{1-x}\text{NiH}_y$ ($x = 0,1, 0,9$; $y = 0, 3$) гидрирование оставляло неизменным или даже наоборот снижало величину МКЭ (например, при $\mu_0\Delta H = 5$ Тл с $-\Delta S_m = 15,7$ Дж/(кг $^{-1}$ К $^{-1}$) у $\text{Gd}_{0,1}\text{Dy}_{0,9}\text{Ni}$ до $-\Delta S_m = 12,5$ Дж/(кг $^{-1}$ К $^{-1}$) у $\text{Gd}_{0,1}\text{Dy}_{0,9}\text{NiH}_3$). Тип фазового магнитного перехода определялся как с помощью анализа кривых Белова-Аррота, так и с помощью анализа величины количественного параметра n , который определялся по формуле [5]:

$$n(T, H) = \frac{d \ln |\Delta S_M|}{d \ln H}.$$

Было обнаружено, что как исходное соединение $\text{Gd}_{0,33}\text{Dy}_{0,33}\text{Y}_{0,33}\text{Ni}$, так и его гидрид $\text{Gd}_{0,33}\text{Dy}_{0,33}\text{Y}_{0,33}\text{NiH}_3$ проявляют магнитный фазовый переход второго порядка, что важно для их практического использования при хранении и транспортировке различных сжиженных газов, включая водород.

ЛИТЕРАТУРА

1. F. Marques, M. Balcerzak, F. Winkelmann, G. Zepon, and M. Felderhoff, *Energy Environ. Sci.*, 14 (2021), <https://doi.org/10.1039/D1EE01543E>.
2. V. B. Chzhan et al. *Materials Chemistry and Physics*, 264 (2021), <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2021.124455>.
3. I. S. Tereshina et al. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 574 (2023), <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2023.170693>.
4. V. Chzhan et al. *Technical Physics Letters*. 46 (2020) 303–306. DOI: 10.1134/S1063785020030189.
5. J. Y. Law et al. *Nat Commun* 9, 2680 (2018). <https://doi.org/10.1038/s41467-018-05111-w>.

NEW HYDROGEN-CONTAINING MATERIALS FOR MAGNETIC COOLING IN THE CRYOGENIC TEMPERATURE RANGE

A. A. Kurganskaya^{1,2}, *Zh. Liu*¹, *I. S. Tereshina*¹, *S. V. Mitrokhin*¹

¹Lomonosov Moscow State University, Moscow

²Russian State Agrarian University – Moscow Timiryazev Agricultural Academy, Moscow

Using multicomponent compounds as functional materials in devices operating on hydrogen fuel, as well as in devices for storing and transporting hydrogen is a promising area of hydrogen materials science [1]. Medium- and high-entropy alloys are known for their ability to withstand high mechanical loads over a wide temperature range, which has attracted particular interest in the properties of their hydrides. Previously, we studied the magnetic and magnetocaloric properties of (RR')Ni compounds and their hydrides [2–4]. This work examines how hydrogenation affects the magnetic and magnetothermal characteristics of the medium-entropy alloy Gd_{0,33}Dy_{0,33}Y_{0,33}Ni. The Gd_{0,33}Dy_{0,33}Y_{0,33}Ni alloy was obtained in an electric arc furnace from a stoichiometric mixture of high-purity elements in a protective argon atmosphere. Its hydride Gd_{0,33}Dy_{0,33}Y_{0,33}NiH₃ was obtained in a Sievert-type setup with an operating hydrogen pressure range of up to 10 MPa. The composition of hydrides was calculated volumetrically using the van der Waals equation. X-ray structural analysis of the samples (XRD) was carried out in the Bragg-Brentano geometry using Cu-K α radiation in the range $2\theta = 10\text{--}120^\circ$ with a step of $0,0072^\circ$. Magnetization isotherms of the samples were obtained in magnetic

fields up to 7 T in the temperature range 2–270 K. The magnetocaloric effect (MCE) was determined by an indirect method using Maxwell's relation. The compound $\text{Gd}_{0,33}\text{Dy}_{0,33}\text{Y}_{0,33}\text{Ni}$ was determined to crystallize in an orthorhombic structure of the FeB type (space group 63, Pnma), while hydrogenation changes the structure type to CrB (space group 62, Cmcm), increasing the crystal cell volume by 22,8 %. The Curie temperatures of both samples were determined by two methods: by analyzing the Belov-Arrot curves, and also by analyzing the dependence of the derivative of magnetization on temperature. It was determined that the Curie temperature of the original sample is 60 K, and that of the hydride is 6 K. An external magnetic field shifts the Curie temperature by 5–6 K towards higher temperatures. It was also determined that hydrogenation significantly increases the magnitude of the MCE, namely at $\mu_0\Delta H = 7 \text{ T} - \Delta S_m = 10,9 \text{ J}/(\text{kg}^{-1}\text{K}^{-1})$ and $-\Delta S_m = 16,5 \text{ J}/(\text{kg}^{-1}\text{K}^{-1})$, and at $\mu_0\Delta H = 5 \text{ T} - \Delta S_m = 8,3 \text{ J}/(\text{kg}^{-1}\text{K}^{-1})$ and $-\Delta S_m = 13 \text{ J}/(\text{kg}^{-1}\text{K}^{-1})$ for $\text{Gd}_{0,33}\text{Dy}_{0,33}\text{Y}_{0,33}\text{Ni}$ and $\text{Gd}_{0,33}\text{Dy}_{0,33}\text{Y}_{0,33}\text{NiH}_3$ respectively. It is worth noting that in the previously studied [2] pseudobinary system of compounds $\text{Gd}_x\text{Dy}_{1-x}\text{NiH}_y$ ($x = 0,1, 0,9$; $y = 0,3$) hydrogenation remained unchanged or even, on the contrary, reduced the value of the MCE (for example, at $\mu_0\Delta H = 5 \text{ T}$ from $-\Delta S_m = 15,7 \text{ J}/(\text{kg}^{-1}\text{K}^{-1})$ to $\text{Gd}_{0,1}\text{Dy}_{0,9}\text{Ni}$ to $-\Delta S_m = 12,5 \text{ J}/(\text{kg}^{-1}\text{K}^{-1})$ for $\text{Gd}_{0,1}\text{Dy}_{0,9}\text{NiH}_3$). The type of magnetic phase transition was determined both by analyzing the Belov-Arrot curves and by analyzing the value of the quantitative parameter n , which was determined by the formula [5]:

$$n(T, H) = \frac{d \ln |\Delta S_M|}{d \ln H}.$$

It was found that both the parent compound $\text{Gd}_{0,33}\text{Dy}_{0,33}\text{Y}_{0,33}\text{Ni}$ and its hydride $\text{Gd}_{0,33}\text{Dy}_{0,33}\text{Y}_{0,33}\text{NiH}_3$ exhibit a second-order magnetic phase transition. Thus, these two multicomponent compounds can be used for storing and transporting liquefied gases, hydrogen in particular.

REFERENCES

1. F. Marques, M. Balcerzak, F. Winkelmann, G. Zepon, and M. Felderhoff, *Energy Environ. Sci.*, 14 (2021), <https://doi.org/10.1039/D1EE01543E>.
2. V. B. Chzhan et al. *Materials Chemistry and Physics*, 264 (2021), <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2021.124455>.
3. I. S. Tereshina et al. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 574 (2023), <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2023.170693>.

4. V. Chzhan et al. Technical Physics Letters. 46 (2020) 303–306. DOI: 10.1134/S1063785020030189.

5. J. Y. Law et al. Nat Commun 9, 2680 (2018). <https://doi.org/10.1038/s41467-018-05111-w>.

Санин Виталий Владимирович

АО «Гиредмет»

Ведущий научный сотрудник
111524, Москва, ул. Электродная, 2с. 1
Вакуумная металлургия,
металлогидридные сплавы, РЗМ

Vitalii Sanin

Sazhin Giredmet JSC

Leading Researcher

111524, Moscow, st. Electrode 2s.1
Vacuum metallurgy, metal hydride alloys,
rare earth metals

E-mail vivsandin@rosatom.ru



ОСОБЕННОСТИ МЕТАЛЛУРГИИ СПЕЦИАЛЬНЫХ СПЛАВОВ С ВЫСОКИМ СОДЕРЖАНИЕМ ТИТАНА, ВКЛЮЧАЯ МЕТАЛЛОГИДРИДНЫЕ МАТЕРИАЛЫ

В. В. Санин¹, С. А. Мельников², Е. Б. Солнцева²

¹АО «Государственный научно-исследовательский и проектный институт редкометаллической промышленности «Гиредмет» им. Н. П. Сажина, Москва

²АО «Ведущий научно-исследовательский институт химической технологии» им. Б. Н. Ласкорина, Москва

Базовым способом получения заготовок для последующей механо-термической обработкой (МТО) является вакуумная металлургия: вакуумно-индукционная плавка (ВИП), вакуумно-дуговая плавка (ВДП) и др. АО «Гиредмет» и АО «ВНИИХТ», обладая вакуумно-плавильным оборудованием занимается разработкой технологий изготовления сплавов, внедряя в том числе собственные разработки технологических основ получения РМ и РЗМ в качестве легирующих и/или рафинирующих добавок.

Одним из направлений массового функционального применения сплавов – является активное внедрение водородных технологий. Основным преимуществом использования металлогидридов (МГ) является – безопасность. Текущее состояние данной отрасли в РФ базируется на раз-

личных модификациях сплава типа AB₅ (LaNi₅). АО «Гиредмет» и АО «ВНИИХТ» успешно освоил технологию выплавки данных материалов с использованием шихтовых и футеровочных материалов, относящихся к базовым основам вакуумной сплавов типа AB и AB₂ (с высоким содержанием Ti, Zr и др.) требует иные подходы в области вакуумной металлургии.

В частности, в настоящий момент АО «Гиредмет» и АО «ВНИИХТ» разрабатывает комплексные технологические решения для выплавки сплавов с высоким содержанием Ti (до 46 вес.%), включая разработку состава керамических смесей для футеровки тигля, выбор шихтовых материалов, оптимизацию процессов выплавки, интеграцию методов выплавки, и т. д.

Для базового AB-сплава FeTi (50/50 ат.%) ключевой показатель примесного содержания кислорода в сплаве составил: O₂ = 0,008 вес.%, выплавленного в при оптимальных режимах и в новом, разрабатываемом *in situ* формируемом тигле. Для сравнения были проведены плавки при аналогичных условиях, содержание составило: O₂ = 0,23 вес.% для корундового тигля (Al₂O₃ – основа) и O₂ = 0,2 вес.% для графитового тигля. Разрабатываемые технологические решения планируется применять для создания новых сплавов с низким примесным содержанием элементов, которые вносят ключевые изменения в функциональные свойства изделий из них.

METALLURGY OF SPECIAL ALLOYS WITH HIGH TITANIUM CONTENT, INCLUDING METAL HYDRIDE MATERIALS

V. V. Sanin¹, S. A. Melnikov², E. B. Solntseva²

¹Sazhin Giredmet JSC, Moscow

²VNIИHT JSC, Moscow

The basic method of obtaining workpieces for subsequent mechanical thermal treatment (MHT) is vacuum metallurgy: vacuum induction melting (VIM), vacuum arc melting (VAM), etc. Giredmet JSC & VNIИHT JSC, having vacuum melting equipment is engaged in the development of technologies for the production of alloys, including introducing its own developments of technological fundamentals for the production of RM and REM as alloying and/or refining additives.

One of the areas of mass functional application of alloys is the active introduction of hydrogen technologies. The main advantage of using metal hydrides (MeH) is safety. The current state of this industry in the Russian Federation is based on various modifications of the alloy type AB₅ (LaNi₅). JSC «Giredmet» & JSC «VNIHT» have successfully mastered the technology of smelting these materials using charge and lining materials related to the basic principles of vacuum metallurgy. The creation of technological lines for the production of more promising alloys such as AB and AB₂ (with a high content of Ti, Zr, etc.) requires different approaches in the field of vacuum metallurgy.

In particular, at the moment, Giredmet JSC & VNIHT JSC are developing comprehensive technological solutions for the smelting of alloys with a high Ti content (up to 46 wt.%), including the development of the composition of ceramic mixtures for crucible lining, selection of charge materials, optimization of smelting processes, integration of smelting methods, etc.

For base AB alloy FeTi (50/50 at.%) the key indicator of the oxygen impurity content in the alloy was: O₂ = 0,008 wt.%, melted under optimal conditions and in a new crucible developed in-situ. For comparison, meltings were carried out under similar conditions, the content was: O₂ = 0,23 wt.% for a corundum crucible (Al₂O₃ – base) and O₂ = 0,2 wt.% for a graphite crucible. The technological solutions being developed are planned to be used to create new alloys with low impurity content of elements, which will make key changes in the functional properties of products made from them.

Военнов Артем Вадимович
ФГУП «ВНИИА»
Инженер
Москва, ул. Сушевская, д. 22
Материаловедение

Voennov Artem
VNIIA
Engineer
Moscow, 22 Sushevskaya st.
Materials science

voennov.artem@gmail.com



ОРИЕНТАЦИОННЫЙ ЭФФЕКТ ПОТОКА НЕЙТРОНОВ ДЛЯ ПЛЕНОК ТИТАНОВОГО ГИДРИДА

А. С. Ханов, С. В. Чеканов, А. В. Военнов

Федеральное государственное предприятие «Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова»

В работе приведены результаты количественной оценки величины ориентационных эффектов для мишеней нейтронных генераторов. Определено, насколько может варьироваться поток нейтронов при изменении текстуры титанового гидрида (ГЦК решетка) мишени, полагая остальные параметры фиксированными. Показано, что большее число нейтронов будет генерироваться в случае текстур [100] и [110] по сравнению с текстурой [111]. Для экспериментального подтверждения ориентационного эффекта в пленках гидрида титана в качестве подложки использовался монокристаллический молибден с различными кристаллографическими ориентациями. Определены полученные ориентационные соотношения подложка-гидрид. При использовании экспериментальных монокристаллических мишеней в составе нейтронных генераторов разница нейтронного потока между экспериментальными образцами с применением монокристаллических мишеней и образцами с применением не текстурированных мишеней составила 20 %, что в свою очередь согласуется с результатами моделирования.

**ORIENTATION EFFECT OF NEUTRON FLUX FOR TITANIUM
HYDRIDE FILMS**

A. S. Khapov, S. V. Chekanov, A. V. Voennov

The Federal State Unitary Enterprise Dukhov Automatics Research Institute
(VNIIA)

The results of quantitative estimation of the magnitude of orientation effects for neutron generator targets are presented. It is determined to what extent the neutron flux can vary when the texture of titanium hydride (FCC lattice) target is changed, assuming other parameters are fixed. It is shown that a larger number of neutrons will be generated in the case of texture [100] and [110] compared to texture [111]. To experimentally confirm the orientation effect in titanium hydride films, monocrystalline molybdenum with different crystallographic orientations was used as a substrate. The obtained substrate-hydride orientation relations were determined. When using experimental monocrystalline targets as part of neutron generators, the neutron flux difference between experimental samples and samples using non-textured targets was 20 %, which in turn agrees with the modeling results.

Сомкина Евгения Владимировна

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

Инженер-исследователь

607188, Россия, г. Саров Нижегородской обл.,

пр-т Мира, д. 37

Химия гидридов, технология и материаловедение

гидридов металлов

Evgenia Vladimirovna Somkina

FSUE RFNC-VNIIEF

Research engineer

37 Mira Avenue, Sarov, Nizhny Novgorod Region,

607188, Russia

Hydride chemistry, technology and materials science

of metal hydrides

evsomkina@vniief.ru



ВЛИЯНИЕ ВИДОВ ОБРАБОТКИ НА ШЕРОХОВАТОСТЬ ПОВЕРХНОСТИ ПРЕССОВАННЫХ ОБРАЗЦОВ ИЗ ГИДРИДА ЛИТИЯ

*Е. В. Сомкина, А. А. Костылева, А. А. Тарасов, Ю. С. Белова,
В. Е. Шатунов*

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

Исследовано влияние видов обработки на шероховатость образцов из гидрида лития. Определена шероховатость образцов после прессования, токарной обработки, вакуумно-термической обработки. Оценка параметров шероховатости проводилась на основе среднего арифметического отклонения профиля и высоты неровностей профиля по десяти точкам. Выявлено, что наиболее ровный профиль с наименьшими значениями неровностей наблюдается у термообработанного образца гидрида лития после повторной токарной обработки поверхности, профили с наибольшими значениями неровностей – у прессованного и термообработанного образца гидрида лития после первичной токарной обработки.

**EFFECT OF TREATMENTS ON SURFACE ROUGHNESS
OF PRESSED LITHIUM HYDRIDE SAMPLES**

E. V. Somkina, A. A. Kostyleva, A. A. Tarasov, Yu. S. Belova, V. E. Shatunov

Russian Federal Nuclear Center – All-Russian Scientific Research Institute
of Experimental Physics, Sarov

The effect of treatments on the roughness of lithium hydride samples was investigated. Roughness of samples after pressing, turning, vacuum-thermal treatment is determined. The roughness parameters were estimated based on the arithmetic mean deviation of the profile and the height of the profile irregularities at ten points. It was found that the most even profile with the lowest values of irregularities is observed in a heat-treated sample of lithium hydride after repeated surface turning, profiles with the highest values of irregularities are observed in a pressed and heat-treated sample of lithium hydride after primary turning.

Секция 4

A12–A14, B12–B17, C15–C25

**АППАРАТУРА И МЕТОДЫ
ИССЛЕДОВАНИЯ**

Session 4

**EQUIPMENT AND RESEARCH
METHODS**

Ананьев Сергей Станиславович
НИИЦ «Курчатовский институт»
Ведущий научный сотрудник
123182, Москва, пл. Академика Курчатова, 1
Термоядерный синтез, физика плазмы,
изотопы водорода

Ananyev Sergey
NRC Kurchatov Institute
Leading Researcher
Ac. Kurchatov sq., 1, Moscow RU-123182
Fusion, plasma physic, hydrogen isotopes

Ananyev_SS@nrcki.ru



ЯЗЫК СОПРЯЖЕНИЯ ТЕОРИИ И ЭКСПЕРИМЕНТА В ФИЗИКЕ ПЛАЗМЫ С ТЕХНОЛОГИЧЕСКИМИ ПРОЦЕССАМИ ВО ВСПОМОГАТЕЛЬНЫХ СИСТЕМАХ ТОПЛИВНОГО ЦИКЛА УСТАНОВКИ ТОКАМАК

С. С. Ананьев

НИИЦ «Курчатовский институт», Москва

Осуществление управляемых реакций термоядерного синтеза предполагает создание физических установок для производства высокоэнергетичных нейтронов и энергии – за счет преобразования кинетической энергии нейтронов или заряженных частиц – продуктов реакции синтеза в электрическую или другие виды энергии. Практически все кандидатные ядерные реакции синтеза предполагают использование изотопов водорода в качестве одного или нескольких компонентов топлива. Третий будет присутствовать (в качестве компонента топлива и продукта) в реакциях D-T и D-D.

Низкие значения сечений взаимодействия компонентов топлива приводят к высоким значениям потоков частиц в вакуумную камеру. В плазму при этом попадет небольшая часть топлива – большая часть частиц попадет в откачку. Для поддержания длительных или стационарных разрядов требуется топливная инжекция, обеспечивающая требуемые параметры плазмы (в т. ч. профили концентрации частиц и изотопный состав).

Они будут в свою очередь зависеть от способа ввода топлива в плазму (типа инъекции). Процессы в основной плазме будут сопровождаться регулярными и импульсными потерями частиц и энергии, что будет приводить к процессам в пристеночной области и диверторе (в т. ч. эрозия материалов внутрикамерных элементов, потери компонентов топлива, потоки нейтралов в плазму через сепаратрису). Для компенсации нежелательных эффектов в пристеночной области осуществляется масштабный газонапуск в вакуумную камеру а также откачка газа из дивертора. Согласование процессов топливной и газовой инъекции совместно с процессами, происходящими в основной и пристеночной/диверторной плазме необходимо для обеспечения условий синтеза/генерации нейтронов (т.е. параметров плазмы).

Установки термоядерного синтеза или ее прототипа должны иметь системы, обеспечивающие параметры плазмы: инъекции, откачки, обработки и хранения газа – эти системы образуют замкнутый топливный цикл. Он должен обеспечивать вакуумные условия в установке, а также обращение компонентов топлива и вспомогательных газов с их контролируемым выбросом [1, 2]. По экономическим и экологическим соображениям он должен быть замкнутым и по возможности ориентированным на стационарную работу. Для концептуального проектирования установки необходимо оценить количество топлива, требуемое для запуска установки, а на этапе технического проектирования установки – сформулировать требования к ним. На оценку данных целевых показателей направлены исследования, представленные в докладе.

К настоящему моменту в мире накоплен большой опыт работы с тритием в различных установках и лабораториях, демонстрация возможности переработки большого количества трития в условиях, необходимых для термоядерной энергетики, реализована как в России, так и в мире. Однако современный уровень развития установок термоядерного синтеза требует дополнительных фундаментальных и прикладных исследований в области термоядерного топливного цикла для них. Подходы и решения, используемые в установках TFTR и JET, проектах ИНТОР и ИТЭР, не могут в полной мере быть использованы по причине импульсно-периодического режима работы и экспериментального назначения этих установок. В стационарно работающей установке, использующей тритий в качестве компонента топлива, необходимо непрерывно обрабатывать значительные его количества, не допуская чрезмерного скапливания и потерь в каждой отдельной системе, а также учитывать влияние режимов горения термоядерной плазмы в токамаке и параметров взаимодействия плазма-стенка.

Это требует выбора технологических решений на основании сведений о потоках газа и его изотопном составе, их интеграции и оптимизации для обеспечения целевых параметров плазмы в различных сценариях работы установки.

Поскольку до настоящего времени все работы на установках токамак проводились в направлении повышения температуры, концентрации плазмы и времени ее удержания, а также мощности синтеза и нейтронного потока, накоплен значительный экспериментальный материал и сформированы подходы для описательного и предсказательного моделирования процессов сопровождающих контроль плазмы и термоядерное горение. Между тем, авторам не известно ни одной методики, которая могла бы связывать параметры плазменного разряда с применяемыми технологиями топливного цикла.

Поскольку для для каждого конкретного проекта установки кандидатные технологии топливного цикла должны выбираться с учетом ожидаемых потоков газа, его изотопного состава и требуемых режимов систем, требуется разработка подхода для определения целевых параметров систем на основании предсказательного моделирования процессов в основной и пристеночной плазме установки. В докладе описывается предлагаемый авторами подход к определению параметров инфраструктуры токамака – систем откачки, инжекции и обработки газа (топливный цикл) на основе параметров плазмы и процессов, происходящих в вакуумной камере установки. Его применение к проектам ТИН-СТ и ДЕМО-ТИН позволило выбрать кандидатные технологии топливного цикла [2].

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

ЛИТЕРАТУРА

1. В. Е. Черковец, В. В. Фрунзе. Тритиевые комплексы термоядерных установок с магнитным удержанием. Москва: Троянт, 2019. С. 218–232.
2. S. S. Ananyev, B. V. Ivanov and B. V. Kuteev. Analysis of promising technologies of DEMO-FNS fuel cycle, Fusion Eng. Des., 161, 111940 (2020).

**THE LANGUAGE OF COUPLING THEORY AND EXPERIMENT
IN PLASMA PHYSICS WITH TECHNOLOGICAL PROCESSES
IN THE FUEL CYCLE SYSTEMS OF THE TOKAMAK FACILITY**

S. Ananyev

NRC «Kurchatov Institute», Moscow

The implementation of controlled fusion reactions involves the creation of physical facilities for the production of high-energy neutrons and energy – by converting the kinetic energy of neutrons or charged particles – the products of the fusion reaction into electrical or other types of energy. Almost all candidate nuclear fusion reactions involve the use of hydrogen isotopes as one or more fuel components. Tritium will be present (as a fuel component and product) in the D-T and D-D reactions.

Low cross sections term or stationary discharges, fuel injection is required to provide the required plasma parameters (including particle concentration profiles and isotopic composition). They will, in turn, depend on the method of introducing fuel into the plasma (type of injection). Processes in the main plasma will be accompanied by regular and pulsed losses of particles and energy, which will lead to processes in the near-wall region and divertor (including erosion of materials of intra-chamber elements, losses of fuel components, flows of neutrals into the plasma through the separatrix). To compensate for undesirable effects in the near-wall region, large-scale gas injection into the vacuum chamber is carried out, as well as gas is pumped out of the divertor. Coordination of fuel and gas injection processes together with the processes occurring in the main and near-wall/divertor plasma is necessary to ensure the conditions for the synthesis/neutrons generation (i.e. plasma parameters).

Fusion facilities or its prototype must have systems that provide plasma parameters: injection, pumping, processing and storage of gas – these systems form a closed fuel cycle. It must ensure vacuum conditions in the facility, as well as the fuel components and auxiliary gases circulation with their controlled release [1, 2]. For economic and environmental reasons, it should be closed and, if possible, oriented towards steady-state regime. For the conceptual design of the facility, it is necessary to estimate the amount of fuel required to start the facility, and at the stage of technical design, to formulate requirements for them. The studies presented in the report are aimed at assessing these target indicators.

To date, the world has accumulated extensive experience in working with tritium in various facilities and laboratories; the demonstration of the possibility of processing large amounts of tritium under the conditions necessary for fusion energy has been implemented both in Russia and in the world. However, the current level of development of fusion facilities requires additional fundamental and applied research in the field of the fuel cycle for them. The approaches and solutions used in the TFTR and JET facilities, INTOR and ITER projects cannot be fully used due to the pulse-periodic operating mode and experimental purpose of these facilities. In a steady-state operation mode facility using tritium as a fuel component, it is necessary to continuously process significant quantities of it, avoiding excessive accumulation and losses in each individual system, and also take into account the influence of the combustion modes of main plasma in the tokamak and plasma-wall interaction parameters. This requires the selection of technological solutions based on information about gas flows and its isotopic composition, their integration and optimization to ensure target plasma parameters in various plant operating scenarios.

Since until now all work on tokamaks has been carried out in the direction of increasing temperature, plasma concentration and its confinement time, as well as fusion power and neutron flux, significant experimental material has been accumulated and approaches have been formed for descriptive and predictive modeling of processes accompanying plasma control and fusion reaction. Meanwhile, the authors do not know of a single technique that could connect the parameters of a plasma discharge with the applied fuel cycle technologies.

Since for each specific facility design, candidate fuel cycle technologies must be selected taking into account the expected gas flows, its isotopic composition and required system modes, it is necessary to develop an approach to determine the target parameters of systems based on predictive modeling of processes in the main and near-wall plasma of the facility. The report describes the approach proposed by the authors to determining the parameters of the tokamak infrastructure – gas pumping, injection and processing systems (fuel cycle) based on plasma parameters and processes occurring in the vacuum chamber of the tokamak. Its application to the FNS-ST and DEMO-FNS projects made it possible to select candidate fuel cycle technologies [2].

The study was carried out within the framework of the scientific program of the National Center for Physics and Mathematics (Project 8 «Physics of Hydrogen Isotopes»).

REFERENCES

1. V. E. Cherkovets, V. V. Frunze. Tritium complexes of thermonuclear installations with magnetic confinement, Moscow: Trovant, 2019. 232 p.: ill. – Bibliography: p. 218–232.
2. S. S. Ananyev, B. V. Ivanov, B. V. Kuteev. Analysis of promising technologies of DEMO-FNS fuel cycle, *Fusion Eng. Des.*, 161, 111940 (2020).

Бондаренко Сергей Дмитриевич
НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
Начальник химико-технологического отдела
реактора ПИК
г. Гатчина, мкр. Орлова роща, д. 1
Разделение изотопов водорода

Bondarenko Sergei
NRC «Kurchatov Institute» – PNPI
Head of the chemical-technological department
of the PIK reactor
Gatchina, microdistrict Orlova Roshcha, 1
Separation of hydrogen isotopes
bondarenko_sd@pnpi.nrcki.ru



АДАПТАЦИЯ ЭЛЕКТРОЛИЗЕРОВ ДЛЯ РАБОТЫ С ТЯЖЕЛОЙ ВОДОЙ

С. Д. Бондаренко, И. А. Алексеев, Т. В. Васянина, О. А. Федорченко

НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ

Применение тяжелой воды в качестве замедлителя нейтронов для исследовательских атомных реакторов позволяет с одной стороны получать компактную активную зону и высокую плотность нейтронных потоков, однако, с другой стороны требуется создавать средства для поддержания ядерно-физических свойств тяжелой воды, т. е. выполнять изотопную очистку от протия и нарабатываемого трития. Для этих целей в НИЦ КИ – ПИЯФ разрабатывают и развивают технологии изотопной очистки тяжелой воды различными методами. Наиболее перспективным для этих целей полагают сочетание методов электролиза, изотопного обмена и криогенной ректификации.

Для изотопной очистки тяжелой воды комбинацией методов электролиза и изотопного обмена в системе вода-водород с использованием гидрофобного катализатора важным элементом технологии является электролизная установка.

Серийно выпускаемые электролизеры независимо от типа как щелочные, так и с твердополимерным электролитом имеют ряд особенностей,

связанных с наличием сдувок газов и дренажей для жидкости, которые при работе с тяжелой водой будут являться источниками потерь тяжелой воды и эмиссии трития в окружающую среду. Ввиду высокой стоимости тяжелой воды, а также содержания трития в ней применение серийно выпускаемых электролизеров в составе установок для работы с тяжелой водой ограничено лабораторным применением.

В работе приводятся результаты опыта адаптации щелочного электролизера ФС-525 опытно-промышленной установки ЭВИО, электролизера HyState 15/30 для установки извлечения трития реактора ПИК и создания нового электролизера А6/ДТ ООО «Поликом» с твердополимерным электролитом для реконструкции установки ЭВИО.

ADAPTATION OF ELECTROLYZERS FOR WORKING WITH HEAVY WATER

S. D. Bondarenko, I. A. Alekseev, O. A. Fedorchenko, T. V. Vasyanina

NRC «Kurchatov Institute» – PNPI

The use of heavy water as a neutron moderator for research nuclear reactors allows, on the one hand, to obtain a compact active zone and a high neutron flux density; however, on the other hand, it is necessary to create means to maintain the nuclear physical properties of heavy water, i.e. perform isotope purification from protium and produced tritium. For these purposes, NRC KI – PNPI is developing technologies for isotope purification of heavy water using various methods. The most perspective for these purposes is considered to be a combination of electrolysis, isotope exchange and cryogenic distillation methods.

Electrolysis assembly is an important element of the technology for isotope purification of heavy water based on a combination of electrolysis and isotope exchange methods in the water-hydrogen system using a waterproof catalyst

Serially produced electrolyzers, regardless of type, both alkaline and with solid polymer electrolyte, have a number of features associated with the presence of gas vents and liquid drains, which, when working with heavy water, will be sources of heavy water losses and tritium emissions into the environment. Due to the high cost of heavy water, as well as the tritium content in it,

the use of commercially produced electrolyzers as part of installations for working with heavy water is limited to laboratory use.

The paper presents the results of the experience of adapting the FS-525 alkaline electrolyzer for the EVIO pilot plant, the HyState 15/30 electrolyzer for the tritium removal facility of the PIK reactor, and the creation of a new A6/DT electrolyzer by Polikom LLC with a solid polymer electrolyte for the reconstruction of the EVIO pilot plant.

Варежкин Александр Владимирович

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

Доцент

Миусская площадь, д. 9

Мембранные технологии, высокочистые
вещества

Varezhkin Alexander

Mendeleev University of Chemical Technology

Assistant professor

Membrane technology, Highly pure substances

ale-varezhkin@yandex.ru



**РАЗРАБОТКА ПОЛИМЕРНОЙ МЕМБРАНЫ В ФОРМЕ
АСИММЕТРИЧНОГО ПОЛОГО ВОЛОКНА ДЛЯ ВЫДЕЛЕНИЯ
ВОДОРОДА ИЗ ГАЗОВЫХ СМЕСЕЙ**

А. В. Варежкин

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

Паровая конверсия метана – самый распространенный промышленный способ получения водорода. Это многоступенчатый технологический процесс, который включает в себя, как минимум, четыре стадии:

- 1) конверсия метана;
- 2) выделение водорода из продуктов конверсии;
- 3) дополнительная конверсия с целью выведения CO_2 и CO ;
- 4) очистка водорода, как минимум, до технического качества.

Стадия 2 может быть реализована, в частности, мембранным методом на основе полимерной асимметричной мембраны с плотным селективным слоем. Процесс выделения водорода из газовых смесей протекает под давлением вплоть до 13,5 МПа, что определяет использование полуволоконных мембран с внешним диаметром меньше 250 мкм.

В состав смеси на выходе со стадии 2 входят H_2 , CH_4 , CO и CO_2 , но концентрации компонентов сильно зависят от работы конкретного реактора конверсии. В любом случае при использовании мембранного газоразделения необходима, как минимум, двухступенчатая схема, где на пер-

вой ступени отделяется CH_4 , так как селективность разделения водорода по отношению к компонентам смеси для стандартных мембранных материалов падает в ряду CH_4 , CO , CO_2 .

Поскольку в РФ нет промышленного производства мембран данного типа, то необходимо разработать технологию формования, которая позволила бы изготовить мембрану необходимого качества в промышленном масштабе.

Мембрана изготавливалась методом фазовой инверсии. Разработка этой технологии предполагает наличие формовочной системы, под которой понимается состав и температура полимерного раствора, тип нерастворителей и оптимальный набор параметров формования мембраны из этого полимерного раствора.

Для управления процессом формования мембраны была принята модель формирования асимметричной структуры, которая предполагает наличие тонкого и плотного селективного слоя на поверхности мембраны, располагающегося на пористой «подложке» с минимально возможным сопротивлением трансмембранному переносу газа.

В качестве модели материала мембраны с учетом комплекса свойств полимера и соображений коммерческой доступности был выбран полиэфиримид ($\text{C}_{37}\text{H}_{24}\text{O}_6\text{N}_2$)_n.

На данном полимере отработаны такие параметры формовочной системы как концентрация полимера в растворе, его температура и состав, давление внутреннего нерастворителя, время экспозиции полого волокна на воздухе.

Для модельной газовой системы гелий-азот, получены образцы мембран с идеальной селективностью 92 ± 5 и удельной проницаемости по гелию 156 ± 11 $\text{дм}^3(\text{н.у.}) \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{ч}^{-1}$ при плановых показателях 100 и 100 $\text{дм}^3(\text{н.у.}) \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{ч}^{-1}$ соответственно.

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

DEVELOPMENT OF AN ASYMMETRIC HOLLOW-FIBER POLYMER MEMBRANE FOR HYDROGEN SEPARATION FROM GAS MIXTURES

Al. Varezhkin

Mendeleev University of Chemical Technology

Methane steam reforming is the most common industrial method for producing of hydrogen. This is a multi-stage technological process that includes at least four stages:

- 1) methane conversion;
- 2) release of hydrogen from conversion products;
- 3) additional conversion to remove CO₂ and CO;
- 4) hydrogen purification, at least to technical quality.

Stage 2 can be implemented, in particular, by a membrane method based on a polymer asymmetric membrane with a dense selective layer. The process of hydrogen separation from gas mixtures occurs under pressure up to 13,5 MPa, which determines the use of hollow fiber membranes with an outer diameter of less than 250 microns.

Gas mixture at the exit from stage 2 includes H₂, CH₄, CO and CO₂, but the concentrations of the components are highly dependent on the operation of the conversion reactor. In any case, when using membrane gas separation, at least a two-stage scheme is required, where CH₄ is separated in the first stage, since the selectivity of hydrogen separation with respect to the components of the mixture for standard membrane materials decreases in the series CH₄, CO, CO₂.

Since there is no industrial production of membranes of this type in the Russian Federation, it is necessary to develop a molding technology that would allow the production of a membrane of the required quality on an industrial scale.

The membrane was manufactured using the phase inversion method. The development of this technology requires the presence of a molding system, which refers to the composition and temperature of the polymer solution, the type of non-solvents and the optimal set of parameters for molding the membrane from this polymer solution.

To control the process of membrane formation, a model for the formation of an asymmetric structure was adopted, which assumes the presence of a thin and dense selective layer on the surface of the membrane, located on a porous

«substrate» with the minimum possible resistance to transmembrane gas transfer.

Polyetherimide ($C_{37}H_{24}O_6N_2$)_n was chosen as a model of the membrane material, taking into account the complex properties of the polymer and considerations of commercial availability.

Using this polymer, such parameters of the molding system as the concentration of the polymer in the solution, its temperature and composition, the pressure of the internal non-solvent, and the exposure time of the hollow fiber to air were tested.

For a model helium-nitrogen gas system, membrane samples with an ideal selectivity of 92 ± 5 with a specific helium permeability of $156 \pm 11 \text{ dm}^3(\text{STP}) \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$ were obtained with planned values of 100 and $100 \text{ dm}^3(\text{STP}) \cdot \text{y.} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$, respectively.

The research was carried out within the framework of the scientific program of the

The study was carried out within the framework of the scientific program of the National Center for Physics and Mathematics, direction No. 8 «Physics of Hydrogen Isotopes».

Рогожина Марина Анатольевна
ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»
Старший научный сотрудник
607188, Россия, г. Саров Нижегородской обл.,
пр-т Мира, д. 37

Rogozhina Marina
FSUE «RFNC-VNIIEF»
Senior researcher
607188, Sarov, Nizhny Novgorod region, Russia
oefimova@otd13.vniief.ru



КРИОГЕННАЯ МИШЕНЬ НЕПРЯМОГО ОБЛУЧЕНИЯ ДЛЯ ЛТС

М. А. Рогожина, Е. Ю. Зарубина, И. А. Чугров

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

Наиболее перспективным типом мишеней для лазерного термоядерного синтеза является криогенная мишень непрямого облучения. Описан принцип работы мишени, требования к конструкции, этапы ее создания.

Исследования в области лазерного термоядерного синтеза проводятся на различных типах мишеней. Наиболее перспективным типом мишеней для зажигания термоядерной реакции является криогенная мишень непрямого облучения. В концепции непрямого облучения сферически симметричное сжатие DT-топлива происходит под действием вторичного рентгеновского излучения [1]. Мишень представляет собой бокс-конвертор, в котором в результате поглощения интенсивного лазерного излучения генерируется рентгеновское излучение. Рентгеновское излучение должно симметрично обжечь находящуюся в центре бокса-конвертора сферическую оболочку с твердым водородным топливом, которое равномерно распределено по внутренней стенке оболочки в виде гладкого и однородного по толщине слоя льда [2]. В результате облучения поверхность оболочки испаряется, создавая ударную волну, направленную

внутри и оказывающую давление на слой топлива. В результате этого процесса топливо сжимается до сверхвысоких плотностей и нагревается до высоких температур, что может запустить термоядерную реакцию.

К конструкции таких мишеней предъявляются высокие требования к геометрии и размеру элементов, точности их изготовления и сборки, герметичности, качеству криогенного слоя и др. [3]. Эти требования формируются из необходимости обеспечения условий для формирования слоя водородного топлива требуемых параметров и снижения энергетических потерь для достижения максимальной температуры и плотности топлива в точке зажигания.

Создание криогенной мишени непрямого облучения – сложная многоуровневая задача, заключающаяся в нескольких этапах:

- разработка концепции криогенной мишени непрямого облучения;
- разработка и производство составных элементов мишени, их аттестация;
- прецизионная сборка мишени (расположение элементов с микронной точностью относительно друг друга) и ее аттестация;
- создание криогенного слоя требуемого качества;
- аттестация криогенного слоя;
- постановка мишени на эксперимент по зажиганию без потери качества слоя.

Для реализации данных этапов были разработаны и реализованы различные технологии изготовления и аттестации элементов криогенной мишени. Используемые технологии позволяют изготавливать другие типы лазерных мишеней.

ЛИТЕРАТУРА

1. Sangster T. C., Betty R. et al. Cryogenic DT and D2 Targets for Inertial Confinement Fusion // LLE Review. 2010. Vol. 108. P. 167–178.
2. Рогожина М. А., Зарубина Е. Ю. Технология создания криогенной мишени непрямого облучения для лазерного термоядерного синтеза // Забабахинские научные чтения: сборник материалов XVI Международной конференции: Изд-во РФЯЦ-ВНИИТФ. 2023. С. 229–230.
3. Rogozhina M. A., Zarubina E. Yu. Formation of a Cryogenic Deuterium Uniform-Thickness Layer in a Spherical Shell as a Step in Making a Cryogenic Target for Laser Fusion // Physics of Atomic Nuclei. 2022. Vol. 85. No. 10. P. 1642–1645. ISSN 1063-7788.

Бобырь Николай Павлович
НИИ «Курчатовский институт»
Заместитель начальника отдела
123098, Москва, пл. Академика Курчатова, 1
Изотопы водорода,
материалы термоядерных реакторов

Bobyry Nikolay
NRC «Kurchatov Institute»
Deputy Head of Department
1 Kurchatov Square, Moscow, 123098, Russia
Hydrogen isotopes,
Fusion reactor materials
Bobyry_NP@nrcki.ru



ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ ПОДГОТОВКИ НЕЙТРОННО ОБЛУЧЕННЫХ ОБРАЗЦОВ МАТЕРИАЛОВ ТЯЖ К ИССЛЕДОВАНИЮ ЗАХВАТА ДЕЙТЕРИЯ

Н. П. Бобырь^{1,2}, В. Н. Кочкин¹, А. А. Решетников¹, Ю. Е. Песня¹

¹НИИ «Курчатовский институт», Москва

²АО «Высокотехнологический научно-исследовательский институт
неорганических материалов им. акад. А. А. Бочвара», Москва

Проведение облучения образцов конструкционных материалов с целью формирования дефектной структуры и исследования ее влияния на свойства материалов является важной материаловедческой задачей, которая решается как при подборе новых кандидатных материалов для вновь разрабатываемых установок, так и при исследованиях материалов примененных в уже эксплуатирующихся установках. Формирование дефектной структуры в исследуемых материалах можно выполнять как при облучении образцов на ускорителях, так и в ядерных реакторах. Причем, зачастую, возможностей ускорителя недостаточно для проводимых исследований. Например, в случае исследования массивных образцов, применение заряженных частиц не позволяет создать равномерное распределение дефектов по объему, что вполне реализуемо при облучении в поле быстрых нейтронов.

Ранее была проведена оценка возможностей реактора ИР-8 для облучения перспективных материалов термоядерной энергетики. Реактор ИР-8 – исследовательский реактор бассейнового типа с использованием обычной воды в качестве замедлителя, теплоносителя и верхней защиты.

Облучению в поле тепловых нейтронов при потоке $1,80E+12$ н/с*см² были подвергнуты следующие кандидатные материалы ТЯР: вольфрам и сплавы вольфрама с рением, молибденом, танталом, низкоактивируемая ферритно-мартенситная сталь EK181(Rusfer), бронза Cu1Cr0,1Zr, сплав V-4Ti-4Cr. Доля быстрых нейтронов составила менее 1 %.

В настоящей работе будут представлены результаты облучения кандидатных материалов ТЯР в канале 2-2 в активной зоне реактора ИР-8 при плотности потока нейтронов с энергией более 0,1 МэВ $7,6E+13$ н/с*см². Набранная доза облучения составила $5,95E+19$ н/см². Проведены оценки скорости наработки дефектов структуры для различных материалов.

Произведена оценка времени спада наведенной активности для всех исследуемых материалов до уровня минимально значимой активности.

STEPS OF PREPARATION OF NEUTRON IRRADIATED SAMPLES OF FR MATERIALS FOR THE STUDY OF DEUTERIUM CAPTURE

N. Bobyr^{1,2}, V. Kochkin¹, A. Reshetnikov¹, Yu. Pesnya¹

¹National Research Centre «Kurchatov Institute», Moscow

²Stock Company «A. A. Bochvar High-Technology Research Institute of Inorganic Materials», Moscow

Irradiation of samples of structural materials in order to form a defective structure and study its effect on the properties of materials is an important material science problem, which is solved both in the selection of new candidate materials for newly developed installations, and in the study of materials used in already operating installations. The formation of a defect structure in the materials under study can be performed both by irradiating samples in accelerators and in nuclear reactors. Moreover, often, the capabilities of the accelerator are not enough for ongoing research. For example, in the case of studying massive samples, the use of charged particles does not allow creating a uniform distribution of defects over the volume, which is quite realizable when irradiated in a fast neutron field.

Previously, we have assessed the capabilities of the IR-8 reactor for irradiating promising materials for fusion power engineering. Reactor IR-8 is a pool-type research reactor using ordinary water as a moderator, coolant and top shield.

The following candidate FR materials were irradiated in a thermal neutron field at a flux of $1,80E+12$ n/s*cm²: tungsten and alloys of tungsten with rhenium, molybdenum, tantalum, low-activated ferritic-martensitic steel EK181 (Rusfer), bronze Cu1Cr0.1Zr, alloy V-4Ti-4Cr. The part of fast neutrons was less than 1 %.

In this work, we will present the results of irradiation of candidate FR materials in channel 2-2 in the core of the IR-8 reactor at a neutron flux density with an energy of more than 0,1 MeV to $7,6E+13$ n/s*cm². The accumulated radiation dose was $5,95E+19$ n/cm². Estimates of the rate of accumulation of structural defects for various materials were carried out.

The decay time of the induced activity for all studied materials to the level of minimally significant activity was assessed.

Черкез Дмитрий Ильич
НИИ «Курчатовский институт»
Старший научный сотрудник
123182, пл. Академика Курчатова, 1
Термоядерный синтез, взаимодействие плазмы
с материалами, изотопы водорода

Cherkez Dmitriy
NRC «Kurchatov Institute»
Senior researcher
Ac. Kurchatov sq., 1, Moscow RU-123182
Fusion, plasma-material interaction, hydrogen iso-
topes

Cherkez_DI@nrcki.ru



УСТАНОВКИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПЛАЗМЫ С МАТЕРИАЛАМИ ЛВГПМ НИИ «КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»

*Д. И. Черкез, Н. О. Степанов, Д. А. Козлов, Т. А. Шишкова, Д. С. Дугин,
А. В. Спицын*

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»,
Москва

Одной из ключевых задач при проектировании и создании термоядерных реакторов (ТЯР) является выбор материалов для защиты вакуумной камеры от воздействия плазмы. В качестве обращенных к плазме материалов (ОПМ) для установки ИТЭР, как известно, рассматривались вольфрам и бериллий. Однако на проведенном недавно рабочем совещании поднимался вопрос об отказе от использования бериллия как основного (по площади) материала первой стенки в пользу вольфрама. Данное обстоятельство, а также ряд уже известных особенностей и проблем с ОПМ свидетельствует об отсутствии универсального решения проблемы первой стенки и обуславливает необходимость в расширении перечня материалов и тщательной проработке методов и подходов к ее организации в ТЯР следующих поколений. Для эксплуатации ОПМ в ТЯР необходимо проведение ряда исследований в области взаимодействия изотопов водорода в виде газа и плазмы с материалами, ввиду радиоактивности трития,

его высокой цены и сложности его воспроизводства в условиях ТЯР. Подобные исследования необходимы по ряду причин: для минимизации накопления трития в ОПМ и его паразитных утечек через конструкционные материалы в теплоносители, оптимизации топливного цикла ТЯР и количества трития в установке, оценки жизненного цикла ОПМ и отработки технологии их детритизации и т. д. Для проведения прикладных исследований в области взаимодействия плазмы с поверхностью применительно к задачам термоядерных установок наиболее сложны и интересны – высокопоточные плазменные генераторы, которые позволяют имитировать плазменные потоки ТЯР в наиболее нагруженной области – в диверторе [1], ввиду повышенных требований к стойкости материалов. В тоже время целесообразно проведение исследований и при умеренных величинах плазменных потоков, характерных для первой стенки, ввиду большой площади ее поверхности в ТЯР.

В данной работе будет представлен обзор по некоторым установкам, расположенным в Лаборатории Взаимодействия Газов и Плазмы с Материалами (ЛВГПМ) НИЦ «Курчатовский институт», использующихся для проведения исследований в области взаимодействия газов и плазмы с материалами: установке ПИМ [2], с СВЧ источником плазмы; установке с ВЧ источником плазмы геликонного типа ГПИ-2 [3]; а также стенде для проведения термодесорбционной спектроскопии ТДС [4]. В работе рассмотрены некоторые особенности данных установок, а также представлены наиболее интересные и свежие научные результаты, полученные с их помощью. Отмечено, что доступная в ЛВГПМ стендовая база позволяет проводить релевантные исследования по взаимодействию изотопов водорода с перспективными материалами ТЯР в областях умеренных ионных потоков характерных для первой стенки ТЯР ($\sim 0,5 \div 5 \cdot 10^{21}$ ат. D/(с·м²) для первой стенки ИТЭР.

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

ЛИТЕРАТУРА

1. G. J. van Rooij (2012), Fusion Science and Technology, 61:2Т. 266–272.
2. В. Голубева и др. Приборы и техника эксперимента, № 6 (2017), с. 67–77.

3. Д. И. Черкез и др. ВАНТ. Сер.: Термоядерный синтез. 2020. Т. 43. № 3. С. 101–110.
4. A. V. Golubeva et al. (2023). Fusion Science and Technology, 79(4), 488–501.

**INSTALLATIONS FOR PLASMA-MATERIAL INTERACTION
INVESTIGATION IN LIGPM NATIONAL RESEARCH CENTER
«KURCHATOV INSTITUTE»**

*D. I. Cherkez, N. O. Stepanov, D. A. Kozlov, T. A. Shishkova, D. S. Dugin,
A. V. Spitsyn*

National Research Center «Kurchatov Institute», Moscow

One of the key tasks in the design and creation of fusion reactors (FR) is the choice of the plasma-facing materials (PFMs) for vacuum chamber protection from plasma exposure. As is known, tungsten and beryllium were considered PFMs for the ITER. However, at a recent workshop, the issue of abandoning the beryllium usage as the main (by area) material of the first wall was raised in favor of tungsten. This circumstance, as well as a number of already known features and problems with the PFMs, indicates the absence of a universal solution of the first wall problem and necessitates the expansion of the list of materials and a thorough study of methods and approaches to its organization in the next-step FR. For the operation of PFMs in the FR, it is necessary to conduct a number of studies in the field of the interaction of hydrogen isotopes in the form of gas and plasma with materials, due to the radioactivity of tritium, its high price and the complexity of its reproduction in the conditions of the FR. Such studies are necessary for a number of reasons: to minimize the accumulation of tritium in the PFMs and its parasitic leakage through structural materials into coolants, to optimize the fuel cycle of the FR and the amount of tritium in the facility, to assess the life cycle of the PFMs and to develop the technology of their detritization, etc. For applied research in the

field of plasma interaction with the surface in relation to the problems of thermonuclear installations, high-flux plasma generators are of most interest, which allow simulating FR plasma flows in the most loaded region - in the divertor [1], due to the increased requirements for the resistance of materials. At the same time, it is expedient to conduct research at moderate values of plasma flows characteristic of the first wall, due to the large area of its surface in the FR.

This paper will provide an overview of some installations located in the Laboratory of Interaction of Gases and Plasmas with Materials (LIGPM) of the National Research Center «Kurchatov Institute», used for research in the field of gases and plasmas material interaction: the PIM installation [2], with a microwave source plasma; installation with a helicon-type RF plasma source GPI-2 [3]; as well as a stand for thermal desorption spectrometry of TDS [4]. The work examines some of the features of these installations, and also presents the most interesting and recent scientific results obtained with their help. It is noted that installations available at LIGPM makes it possible to conduct relevant research on the interaction of hydrogen isotopes with promising FR materials in areas of moderate ion flows characteristic of the first wall of FR ($\sim 0,5 \div 5 \cdot 10^{21}$ at. D/(s·m²) for the first wall of the ITER.

The study was carried out within the framework of the scientific program of the National Center for Physics and Mathematics, direction No. 8 «Physics of Hydrogen Isotopes».

REFERENCES

1. G. J. van Rooij (2012), *Fusion Science and Technology*, 61:2T, 266–272.
2. Golubeva V. et al. *Instruments and Experimental Technique*, No. 6 (2017). P. 67–77.
3. D. I. Cherkez et al. *VANT. Ser.: Thermonuclear synthesis*. 2020. V. 43. No. 3. S. 101–110.
4. A. V. Golubeva et al. (2023). *Fusion Science and Technology*, 79(4), 488–501.

Розенкевич Михаил Борисович

Российский химико-технологический университет

им. Д. И. Менделеева

Профессор

125047, Москва, Миусская площадь, 9

Физико-химические методы разделения

изотопов легких элементов

Rozenkevich Mikhail

Mendeleev University of Chemical Technology

of Russia

Professor

9 Miusskaya Sq., Moscow 125047, Russia

Field of scientific interest: Separation of light element

isotopes by physico-chemical methods

rozenkev@mail.ru

**ПРОБЛЕМА ИСПОЛЬЗОВАНИЯ КАТАЛИЗАТОРОВ
ПРИ ДЕТРИТИЗАЦИИ ГАЗА В УСЛОВИЯХ
ВОЗНИКНОВЕНИЯ ПОЖАРА***М. Б. Розенкевич, А. Н. Букин, С. А. Марунич, Ю. С. Пак*

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

В докладе представлены результаты изучения активности гидрофобного (Н1Р, Япония) и двух гидрофильных (Pt/Al₂O₃, производитель N.E. Chemcat Corporation, Япония и Johnson Matthey, Великобритания) катализаторов в составе системы детритации газовых потоков на ядерных объектах и их поведение в условиях возникновения пожара.

Эксперименты показали, что применение гидрофобного катализатора Н1Р для окисления водорода при комнатной температуре в системе детритации возможно. Однако при пожаре воздействие продуктов сгорания на катализатор в рабочем помещении значительно (в 6–7 раз) снижает каталитическую активность, даже при условии, что дымовые газы поступают в каталитический реактор, находящийся при комнатной температуре. Еще одним важным результатом данного исследования является то, что при пожаре в помещении, где расположен предназначенный для рабо-

ты при комнатной температуре рекомбинатор, за счет пожара возможно повышение температуры реактора до 200 °С при которой этот катализатор не только будет разрушен, но и может стать источником пожара. Этот факт следует учитывать при проектировании комплекса детритизации. Проект в случае возникновения пожара должен обеспечивать переключение потока воздуха на рекомбинатор, расположенный в другом помещении.

Японский гидрофильный катализатор Pt/Al₂O₃, работающий при температуре 200 °С, демонстрирует высокое значение константы скорости процесса окисления водорода, на которую практически не влияет концентрация водорода. Однако окисление на катализаторе органических соединений, образующихся при сгорании изоляции электрических кабелей, приводит к неконтролируемому повышению температуры реактора. Самопроизвольное возгорание этих соединений в линии подвода дымовых газов к реактору представляет собой угрозу сохранения работоспособности катализатора в случае пожара даже в помещениях, обслуживающих систему детритизации, не говоря уже о пожаре в помещениях, где расположен сам рекомбинатор. Поэтому этот катализатор не следует рекомендовать для использования в системе детритизации.

Дымовые газы, проходящие через второй катализатор Pt/Al₂O₃, также приводят к повышению температуры, но до гораздо менее высокого уровня. Эффекта возгорания органических соединений, содержащихся в дымовых газах, не наблюдалось. Это означает, что данный катализатор может быть рекомендован для использования для практического использования в системах очистки газовых потоков.

THE PROBLEM OF USING CATALYSTS FOR GAS DETRITIATION IN FIRE CONDITIONS

M. B. Rozenkevich, A. N. Bukin, S. A. Marunich, Yu. S. Pak

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia

This report provides the results of studying of the activity of the hydrophobic (H1P, Japan) and two hydrophilic (Pt/Al₂O₃, manufacturer by N.E. Chemcat Corporation, Japan, and Johnson Matthey of type 73, Great Britain) catalysts as a part of the detritiation system at nuclear facilities and its behavior in simulation of the fire.

An application of H1P hydrophobic catalyst for the hydrogen oxidation at a room temperature for the detritiation system shows that it is possible. However, the exposure of the combustion products to the catalyst in case of a fire in served premises very significantly (6–7 times) reduces the catalytic activity catalyst even if the fume gases will come to the catalytic reactor kept at a room temperature. One more important result of this study is that in case of a fire in the premises where room temperature recombiners are located, a raise in the temperature of H1P catalyst to 200 °C is possible; therefore, this catalyst will not only be destroyed but also could be a source of the fire. This fact should be taken into consideration during the design of the detritiation facility. The design should ensure that if a fire is in the premises where the recombiners are located, the air flow should be switched to another recombiner located in another room.

Japan Pt/Al₂O₃ hydrophilic catalyst kept at a temperature of 200 °C shows a high apparent rate constant, which practically is not affected by hydrogen concentration. However, an intensive oxidation in the catalyst of the organic compounds formed during the combustion of electrical cables, which leads to uncontrolled raise in a temperature in the reactor. Uncontrolled ignition of those compounds in the line delivering the fume gases to the reactor is a threat to save operation in case of a fire even in the premises served by the detritiation system not speaking about a fire in the premises where the recombiners are located. Therefore, this catalyst should not be recommended for a use in the detritiation system.

The fume gases passing through the another Pt/Al₂O₃ catalyst also increase the temperature but to much less higher level. The effect of the ignition of the organic compounds formed during combustion of the fume gases was not observed. This means that this catalyst can be recommended for use in gas stream detritiation systems.

Чуканов Александр Николаевич
ФГБОУ ВО «ТГПУ им. Л. Н. Толстого»
Ведущий научный сотрудник
300026, Россия, г. Тула, пр-т Ленина, 125
Деградация и деструкция сталей и сплавов
при внешнем воздействии различной
физической природы

Chukanov Alexander Nikolaevich
L. N. Tolstoy TSPU
Leading Researcher
125 Lenin Ave., 300026, Tula, Russia
Degradation and destruction of steels and alloys
under external influence of various physical nature



e-mail: alexchukanov@yandex.ru

АВТОМАТИЗАЦИЯ ИЗМЕРЕНИЙ ВНУТРЕННЕГО ТРЕНИЯ В СПЛАВАХ РАЗЛИЧНОГО ПРОИЗВОДСТВА

А. Н. Чуканов¹, А. А. Яковенко², Е. В. Цой¹, М. Ю. Моденов³

¹Тульский государственный педагогический университет
им. Л. Н. Толстого», Тула, Россия.

alexchukanov@yandex.ru; tsoyev@tsput.ru

²ООО «Металлург-Туламаш», Тула, Россия.

despozisiya100@yandex.ru

³ООО «Тульские мехатронные системы», Тула, Россия.

m.modenov@yandex.ru

Введение. Эффекты влияния водорода в твердых телах обусловлены легкостью его проникновения в междоузлия кристаллической решетки растворителя и взаимодействием с элементами структуры. Возникающие при этом микронапряжения, от смещения атомов растворителя из положений равновесия, искажают динамику и механизм взаимодействия дефектов строения, изменяя субструктуру растворителя. Форма нахождения (атомы, молекулы), количество и пути миграции водорода представляют большой интерес для оценки работоспособности металлов и сплавов в конструкциях атомных реакторов, контактирующих с изотопами водорода. Это обусловлено необходимостью изучения механизмов изменения их структу-

ры, а также физико-химических и физико-механических свойств под воздействием водорода, для прогнозирования длительности эксплуатации.

Традиционные методы количественной анализа водорода (вакуумная экстракция), ограничены габаритами образцов. Применение электрохимического анализа насыщения металлов водородом недостаточно обосновано. Помимо всего, недостатком указанных методов является невозможность оценки текущего состояния водорода в объекте и его *in situ* влияния на элементы субструктуры и структуры объекта.

Вместе с тем давно известен метод, позволяющий оценить не только количество поглощенного водорода, диффузионные пути его транспортировки, но и энергию связи металлов-растворителей с ним. Это метод внутреннего трения – ВТ (или механическая спектроскопия – МС). ВТ служит мерой рассеяния энергии в твердом теле в процессе периодического его деформирования и определяется физическими процессами, протекающими при этом. МС заключается в возбуждении механических колебаний в исследуемых образцах и проведении измерений ВТ и модулей упругости на частоте возбуждения/резонанса образца. Высокая чувствительность, сравнительная простота реализации и большой объем получаемой информации о диффузии водорода, его влиянии на динамику дефектов структуры, фазовые переходы позволяет рекомендовать метод ВТ как перспективный для систематического исследования перечисленных процессов.

Цель работы. Создание установки МС нового поколения, отвечающей требованиям полной автоматизации измерений, высокой помехозащищенности, высокой разрешающей способности, простоте управления, совместимостью с современными средами ПО.

Методика исследований. В конце 20-м века измерения МС (ВТ), требовали громоздких аналоговых устройств: звуковых генераторов, блоков фильтрации сигналов, амперметров, осциллографов, дискриминаторов, пересчетных устройств, самописцев, источников тока, регуляторов напряжения печей и т. п. Эти приборы потребляли массу энергии, занимали много места и были сложны в управлении. Полученную информацию зачастую записывали в журнал для построения графиков зависимостей ВТ. С совершенствованием элементной базы часть перечисленных устройств заменили на электронные. Установки МС стали компактнее. Их работу связали с ПК, чтобы сохранять, обрабатывать и визуализировать информацию.

Однако, алгоритм измерений МС оставался архаичным. Даже полуавтоматический режим работы установок требовал постоянного контроля

квалифицированного оператора. Скорость его и появившегося ПО реакции на изменения в поведении образцов оставалась низкой. Регулировка температурных режимов (ПИД) не была плавной. Отставание в конструктиве установок МС было связано с утратой интереса к методу на фоне отсутствия (ухода) квалифицированных научных кадров, способных решать современные задачи.

Результаты исследований. С появлением микропроцессоров и микроконтроллеров, созданием новых средств программирования открылись широкие перспективы для совершенствования МС в исследовании материалов как традиционных (слитковых), так и инновационных (аддитивных) технологий производства. Программная эмуляция ряда устройств позволила заменить большую часть приборов МС хорошим ПО. Для измерений стала необходима только конструкция крепления образца, термо/криокамера, датчик/датчики и комплексная плата, сочетающая с помощью ПО функции остальных приборов. Использование современной микропроцессорной техники позволяет создать ультракомпактную установку МС, исключая влияние оператора на результат. Сделать ее работу высокоскоростной. Практически мгновенно настраиваться на резонанс системы и измерять ВТ, демпфирующую способность, модули упругости с минимальным шагом по амплитуде и температуре. Сохранять информацию представлять ее графически.

Выводы. Микропроцессорный аппаратно-программный комплекс (АПК) МС создали специалисты ТГПУ им. Л. Н. Толстого. Продолжая традиции Тульской металлофизической школы МС, они совместно с ООО «Тульские мехатронные системы» и ООО «Тульские цифровые решения», разработали универсальную центральную плату управления с миниатюрными принимающими платами, а также комплексное ПО для управления процессом измерения зависимостей ВТ в частотном диапазоне от $10\text{--}20 \cdot 10^3 \text{ с}^{-1}$.

При разработке АПК использовали методы теории и расчета и проектирования функциональных автоматических систем управления (АСУ), физики колебательных процессов, механики материалов, несовершенной упругости. Схемотехнические решения выполнили на базе микроконтроллеров *stm32f429vet6* и *stm32g0* с микросборкой на ОУ ОР2177 для цифрового анализа сигнала на АЦП-ЦАП 12 бит. Программную реализацию реализовали в среде *Keily uVision* с моделированием работы прототипа АПК в среде *Proteus 8*. На выполненные решения поданы заявки на патенты и получены 4 Свидетельства о государственной регистрации ПО для АПК.

**AUTOMATION OF INTERNAL FRICTION MEASUREMENTS
IN ALLOYS OF VARIOUS PRODUCTION**

*A. N. Chukanov*¹, *A. A. Yakovenko*², *E. V. Tsoi*¹, *M. Yu. Modenov*³

¹Tula State Pedagogical University named after L. N. Tolstoy, Tula, Russia
alexchukanov@yandex.ru

²OOO Metallurg-Tulamash, Tula, Russia
despozisiya100@yandex.ru

³OOO «Tula Mechatronic Systems», Tula, Russia
m.modenov@yandex.ru

Introduction. The effects of hydrogen in solids are due to the ease of its penetration into the interstices of the solvent crystal lattice and interaction with structural elements. The resulting micro-stresses, from the displacement of solvent atoms from equilibrium positions, distort the dynamics and mechanism of interaction of structural defects, changing the substructure of the solvent. The shape of the location (atoms, molecules), the amount and migration routes of hydrogen are of great interest for evaluating the performance of metals and alloys in the designs of nuclear reactors in contact with hydrogen isotopes. This is due to the need to study the mechanisms of changing their structure, as well as physico-chemical and physico-mechanical properties under the influence of hydrogen, in order to predict the duration of operation.

Traditional methods of quantitative analysis of hydrogen (vacuum extraction) are limited by the size of the samples. The use of electrochemical assessment of metal saturation with hydrogen is insufficiently justified. In addition, the disadvantage of these methods is the inability to assess the current state of hydrogen in the object and its in situ effect on the elements of the substructure and structure of the object.

At the same time, a method has long been known that makes it possible to estimate not only the amount of absorbed hydrogen, the diffusion routes of its transportation, but also the binding energy of solvent metals with it. This is the internal friction method – IF (or mechanical spectroscopy – MS). IF serves as a measure of energy dissipation in a solid during its periodic deformation and is determined by the physical processes occurring during this process. MS consists in the excitation of mechanical vibrations in the samples under study and measurements of IF and elastic modulus at the excitation/resonance frequency of the sample. The high sensitivity, comparative simplicity of implementation and the large amount of information obtained on hydrogen diffusion, its effect

on the dynamics of structural defects, and phase transitions allows us to recommend the IF method as promising for the systematic study of these processes.

The purpose of the work. Creation of a new generation MS installation that meets the requirements of full measurement automation, high noise immunity, high resolution, ease of control, compatibility with modern software environments.

Research methodology. At the end of the 20th century, measuring MS (IF) required bulky analog devices: sound generators, signal filtering units, ammeters, oscilloscopes, discriminators, recounters, recorders, current sources, furnace voltage regulators, etc. These devices consumed a lot of energy, took up a lot of space and were difficult to control. The information received was often recorded in a log to plot the dependencies of the IF. With the improvement of the element base, some of the listed devices were replaced with electronic ones. MS installations have become more compact. Their work was connected to a PC in order to save, process and visualize information.

However, the MS measurement algorithm remained archaic. Even the semi-automatic operation of the installations required constant monitoring by a qualified operator. The rate of its occurrence in response to changes in the behavior of the samples remained low. The temperature control (PID) was not smooth. The lag in the design of MS installations was associated with a loss of interest in the method against the background of the absence (departure) of qualified scientific personnel capable of solving modern problems.

The results of the research. With the advent of microprocessors and microcontrollers, the creation of new programming tools, new opportunities have opened up for improving MS in the study of new materials, both traditional (ingot) and innovative (additive) technologies. Software emulation of a number of devices made it possible to replace most of the MS devices with good software. For measurements, only the mounting structure of the sample, a thermo/cryocamera, a sensor/sensors and a complex board combining the functions of other devices became necessary. The use of modern microprocessor technology allows you to create an ultra-compact installation that eliminates the operator's influence on the result. Make her work faster. Almost instantly adjust to the resonance of the system and measure IF, damping capacity, elastic modulus with a minimum step in amplitude and temperature. Save information and present it graphically.

Conclusions. The microprocessor hardware and software complex (HSC) MS was created by specialists of TSPU named after L.N. Tolstoy. Continuing the traditions of the Tula Metallophysics School of MS, they, together with «Tula Mechatronic Systems LLC» and «Tula Digital Solutions LLC», devel-

oped a universal central control board with miniature receiving boards, as well as comprehensive software for controlling the measurement of IF dependencies in the frequency range from $10\text{--}20 \cdot 10^3 \text{ s}^{-1}$.

During the implementation, methods of theory and calculation of automatic control systems (ACS), oscillatory processes, and design of functional ACS were used. Circuit design solutions were performed on the basis of stm32f429vet6 and stm32g0 microcontrollers with an OP2177 op-amp micro-assembly for digital signal analysis on a 12-bit ADC-DAC. The software implementation was performed in the Keily uVision environment with simulation of the work of the prototype of the agro-industrial complex in the Proteus 8 environment. Patent applications were filed for the completed solutions and 4 Certificates of state registration of software for the hardware and software complex were obtained.

Мусяев Рафаэль Камилевич

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

Ведущий научный сотрудник

607190, Россия, г. Саров, пр. Мира, д. 37

Тритиевые технологии, гидриды металлов,
физика плазмы, изотопы водорода**Musyaev Rafael**Russian Federal Nuclear Center – All-Russian
Research Institute of Experimental Physics
(RFNC-VNIIEF)

Leading Researcher

Sarov, Nizhny Novgorod region, RU-607190

Tritium technology, hydride of metals,
plasma physic, hydrogen isotopes

RKMusyaev@vniief.ru

**СИСТЕМА ТРИТИЕВОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЙ
НЕЙТРОННО-ИЗБЫТОЧНЫХ ЯДЕР НА ФРАГМЕНТ-СЕПАРАТОРЕ
АКУЛИНА-2**

*Р. К. Мусяев, И. П. Максимкин, А. А. Юхимчук, В. В. Балувев, А. А. Кирдяшкин,
О. А. Тивикова, А. В. Рыжухина, В. М. Першина, Е. В. Буряк, А. В. Вертей,
А. И. Гуркин, О. П. Вихлянцева, С. В. Фильчагин*

В РФЯЦ-ВНИИЭФ разработана инфраструктурная система тритиевого обеспечения (СТО) для безопасной работы специализированного оборудования с целью наполнения физических мишеней с определенной плотностью трития (в газовых и жидких фазах) при проведении ядерно-физических исследований на фрагмент-сепараторе АКУЛИНА-2 в ЛЯР ОИЯИ (г.Дубна). Она структурно состоит из трех основных сопряженных составных частей: 1) Блока мишенного, устанавливаемого в зависимости от режима работы либо в вытяжном шкафу, либо в реакционной камере; 2) Системы утилизации с генератором и ловушкой трития и газовакуумными коммуникациями, расположенными в перчаточном боксе; 3) Инфраструктуры системы очистки на базе блока газоочистки с накопительным ресивером, перчаточного бокса и распределенной газовакуумной системой для вакуумирования и циркуляции газовой среды.

В докладе представлены принципы работы, характеристики составных частей СТО и различные режимы безопасной эксплуатации при наполнении и охлаждении/отеплении мишени с тритием, а также способ измерения толщины и формы мишени в ходе сеанса.

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

TRITIUM SUPPORT SYSTEM FOR NEUTRON-EXCESS NUCLEI AT FRAGMENT-SEPARATOR ACCULINNA-2

*R. K. Musyaev, I. P. Maksimkin, A. A. Yukhimchuk, V. V. Baluev,
A. A. Kirdyashkin, O. A. Tivikova, A. V. Ryzhukhina, V. M. Pershina,
E. V. Buryak, A. V. Vervey, A. I. Gurkin, O. P. Vikhlyantsev, S. V. Filchagin*

RFNC-VNIIEF has developed an infrastructure tritium support system for the safe operation of the specialized equipment in order to fill physical targets with certain tritium density (in gas and liquid phases) during nuclear physics studies at the ACCULINNA-2 fragment-separator in LNR JINR (Dubna). It consists of three main interfaced components: 1) Target unit, installed depending on the operating mode either in the fume hood or in the reaction chamber; 2) Disposal systems with tritium generator and trap and gas-vacuum lines located in the glove box; 3) Cleaning system infrastructure based on a gas cleaning unit with a storage receiver, a glove box and a distributed gas-vacuum system for vacuum pumping and gas medium circulation.

The report presents the principles of operation, characteristics of the support system components and various modes of safe operation during filling and cooling/heating of the target with tritium, as well as the method of measuring thickness and shape of the target during a session.

The study was carried out within the framework of the scientific program of the National Center for Physics and Mathematics, project № 8 «Physics of Hydrogen Isotopes».

Бакулин Дмитрий Викторович

АО «НИКИЭТ»

Ведущий инженер

Москва, пл. Академика Доллежалея, д. 1, к. 3
Канальные ядерные энергетические установки.
Конструирование и эксплуатация

Bakulin D. V.

NIKIET JSC

Lead engineer

Moscow, Academician Dollezhal sq., 1, b.3
Channel nuclear power plant. Designing
and operation

bakulin@nikiet.ru



НАВОДОРОЖИВАНИЕ ЦИРКОНИЕВЫХ ЧАСТЕЙ КАНАЛОВ СУЗ РБМК-1000

*Д. В. Бакулин, В. Д. Балдин, А. Н. Бирюков, Б. С. Родченков,
С. Н. Терешин, М. В. Коневец, К. И. Шутько*

АО «НИКИЭТ»

В работе представлены результаты комплекса расчетно-аналитических работ по исследованию наводороживания циркониевого сплава каналов системы управления и защиты (СУЗ) реакторов РБМК-1000. В ходе работ выполнен анализ условий и истории эксплуатации каналов СУЗ, проведены послереакторные исследования каналов, эксплуатировавшихся более 30 лет, выполнен комплекс экспериментальных работ по изучению наводороживания циркониевого сплава, формированию скоплений гидридов в металле в лабораторных условиях и возможности их выявления методами неразрушающего контроля, а также выполнено расчетное обоснование прочности каналов и разработана методика оценки их технического состояния и остаточного ресурса по критерию водородного охрупчивания

**THE HYDROGENATION OF ZIRCONIUM PARTS
IN THE RBMK-1000 REACTOR CONTROL AND PROTECTION
SYSTEM CHANNELS**

*D. V. Bakulin, V. D. Baldin, A. N. Biryukov, B. S. Rodchenkov,
S. N. Tereshin, M. V. Konevets, K. I. Shutko*

NIKIET JSC

This paper presents the results of a series of computational and analytical studies to investigate the hydrogenation of zirconium alloy in the RBMK-1000 reactor control and protection system channels. The following was undertaken as part of the studies: an analysis of the CPS channel conditions and operating history, a post-irradiation examination of channels with a 30-year service life, a series of experimental studies to investigate the hydrogenation of zirconium alloy, formation of hydride clusters in metal in laboratory conditions and possibility of their detection by non-destructive testing methods, a computational channel strength justification, and development of a methodology to assess technical state and residual life of the channels with regard for the hydrogen embrittlement criterion.

Шишалова Г. В.

Старший научный сотрудник
АО «ГНЦ НИИАР», г. Дмитровград

Shishalova G. V

Senior researcher
RIAR JSC, Dimitrovgrad,

gpk@niiar.ru

**СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ
ДАННЫХ, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ СТУПЕНЧАТОГО
НАГРЕВА И РАСЧЕТНЫМ МЕТОДОМ ПРИ ОПРЕДЕЛЕНИИ
СОДЕРЖАНИЯ ВОДОРОДА В МЕТАЛЛЕ И ОКСИДНЫХ
ПЛЕНКАХ ОБЛУЧЕННЫХ ЦИРКОНИЕВЫХ СПЛАВОВ**

Г. В. Шишалова, Г. П. Кобылянский, И. Н. Волкова

АО «ГНЦ НИИАР», г. Дмитровград

В процессе эксплуатации в атомных реакторах изделия активных зон из циркониевых сплавов окисляются при взаимодействии с водным теплоносителем. Окисление сопровождается выделением водорода, часть из которого поглощается циркониевым материалом, а другая часть выходит в теплоноситель. Доля поглощенного водорода является важным параметром, влияющим на надежность и безопасность изделия при обращении с ним, поскольку образующиеся при охлаждении гидриды циркония могут приводить к опасным последствиям – снижению пластичности изделия вплоть до хрупкого разрушения, а также к размерным изменениям.

Массовая доля водорода в металле коррелирует со степенью гидрирования, наблюдаемого в его микроструктуре. Обычно методом газовой экстракции измеряют общее содержание водорода в окисленном материале и не учитывают массовую долю водорода в оксиде. В работе [1] предлагают вычислять содержание водорода в металле с окисленной оболочкой с помощью формулы, учитывающей общую измеренную массовую долю водорода, плотность металла и оксида, базовую толщину металла и толщину оксида, а также фиксированное содержание водорода в оксиде (1200 ppm).

В АО «ГНЦ НИИАР» для определения содержания водорода в циркониевых сплавах на анализаторе «ELTRA» ОН-900 используется метод ступенчатого нагрева [2]. Анализ экспериментальных результатов показывает, что этот метод с большей достоверностью, чем расчетный, позволяет измерять массовую долю водорода отдельно в металле, исключив вклад водорода из оксида. При этом на погрешность измерения влияет лишь неопределенность массы оксида. В расчетном же методе, наряду с неопределенностью по массе оксида, добавляются и другие неопределенности используемых величин, таких как плотность оксида, его толщина, фиксированное статистически выбранное значение содержания водорода в оксиде. Эти величины могут изменяться в зависимости от состава сплава, условий его изготовления и эксплуатации.

ЛИТЕРАТУРА

1. J. Garcia-Infanta, M. Aullo, D. Schrine, F. Culebras. «Oxidation and Hydrogen Uptake of ZIRLO Structural Components Irradiated to High Burn-Up,» Zirconium in the Nuclear Industry: 17th International Symposium, STP 1543, R. Comstock and P. Barberis, eds., p. 577–606, doi:10.1520/STP154320120191, ASTM International, West Conshohocken, PA 2015.

2. G. V. Shishalova, G. P. Kobylansky, A. A. Sheldyakov, V. Yu. Shishin, A. M. Novikov. «Peculiarities of Application of the Gas Extraction Method for Determination of Hydrogen Content in Samples of Irradiated Zirconium Materials», Inorganic Materials: Applied Research, 2019, Vol. 10, No. 3, p. 737–743.

COMPARATIVE ANALYSIS OF EXPERIMENTAL DATA OBTAINED BOTH BY GRADUAL HEATING METHOD AND BY CALCULATIONS TO DETERMINE HYDROGEN CONTENT IN METAL AND OXIDE FILMS OF THE IRRADIATED ZIRCONIUM ALLOYS

G. V. Shishalova, G. P. Kobylansky, I. N. Volkova

RIAR JSC, Dimitrovgrad

The core components made of zirconium alloys are oxidized when interacting with water coolant during operation in nuclear reactors. The oxidation is followed by hydrogen release, a part of which is absorbed by zirconium materi-

al and the other part is released into coolant. The fraction of absorbed hydrogen is a crucial parameter effecting the reliability and safety of the core component during its handling as zirconium hydrides that appear under cooling may lead to dangerous consequences such as the component plasticity decrease up to brittle fracture and also to dimension changes.

Hydrogen mass fraction in metal correlates with the hydrogenation degree observed in its microstructure. Usually, total hydrogen content is measured with the gas extraction method in the oxidized material. The work [1] proposes to measure the hydrogen content in metal with the oxidized cladding by the formula taking into consideration the measured total hydrogen mass fraction, metal and oxide density, base metal thickness and oxide and also the fixed hydrogen content in oxide (1200 ppm).

RIAR JSC uses a gradual heating method to determine the hydrogen content in zirconium alloy with an analyzer «ELTRA» OH-900 [2]. The analysis of experimental results shows that this method enables to measure separately the hydrogen mass fraction in metal excluding the hydrogen amount from oxide with higher precision than the calculations. Only an uncertainty of oxide mass influences on the measurement error. As for calculations, alongside with the uncertainty of oxide mass, other uncertainties of the used values are added such as oxide density, its thickness, the fixed statistically chosen value of hydrogen content in oxide. These values may change depending on an alloy composition, specifications of manufacture and operation.

REFERENCES

1. J. Garcia-Infanta et al. Zirconium in the Nuclear Industry: 17th Int. Symp., STP 1543, p. 577–606, doi:10.1520/STP154320120191.
2. G. V. Shishalova et al. Inorganic Materials: Applied Research, 2019, V. 10, No. 3. P. 737–743.

Кузьмин Дмитрий Артурович
НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
Инженер-технолог
г. Гатчина, мкр Орлова роща, д. 1
Разделение изотопов водорода

Kuzmin Dmitry
NRC «Kurchatov Institute» – PNPI
Process Engineer
Gatchina, microdistrict Orlova Roshcha, 1
Separation of hydrogen isotopes

kuzmin_da@pnpi.nrcki.ru



ИЗУЧЕНИЕ СПОСОБОВ РЕГЕНЕРАЦИИ ГИДРОФОБНОГО ПЛАТИНОВОГО КАТАЛИЗАТОРА РХТУ-ЗСМ, ИСПОЛЬЗУЕМОГО В УСТАНОВКАХ РАЗДЕЛЕНИЯ ИЗОТОПОВ ВОДОРОДА НИЦ КИ – ПИЯФ

Д. А. Кузьмин, О. А. Федорченко, А. А. Брык, И. А. Алексеев

НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ

Для извлечения трития и протия из тяжелой воды очень эффективно показал себя физико-химический метод каталитического изотопного обмена в системе «жидкая вода – водород» с использованием гидрофобного катализатора РХТУ-ЗСМ, который позволяет вести процесс при умеренных значениях температуры и давления и осуществляется в аппаратах колонного типа. Активность катализатора напрямую влияет на процесс, соответственно, чем она выше, тем больше производительность установок разделения.

Опытно-промышленная установка ЭВИО (Электролиз Воды, Изотопный Обмен) работает без замены катализатор уже почти 30 лет. По регламенту регенерация катализатора в установке ЭВИО производится путем продувки колонн сухим азотом с нагревом до 75 °С. Однако, в последнее время активность катализатора снизилась, что повлекло за собой заметное снижение производительности. Авторами исследованы альтернативные способы регенерации гидрофобного катализатора на лаборатор-

ной установке, такие как регенерация водородом, кислородом и воздухом. Эксперименты показали, что чистый кислород и воздух позволяют восстановить первоначальную активность катализатора и даже увеличить ее. Данные выводы были проверены на установке ЭВИО, в результате удалось увеличить производительность более чем на 20 %.

STUDY OF METHODS FOR REGENERATION THE HYDROPHOBIC PLATINUM CATALYST RCTU-3SM THAT USED IN HYDROGEN ISOTOPE SEPARATION UNITS OF NATIONAL RESEARCH CENTER «KURCHATOV INSTITUTE» – PNPI

D. A. Kuzmin, O. A. Fedorchenko, A. A. Bryk, I. A. Alekseev

NRC «Kurchatov Institute» – PNPI

For the extraction of tritium and protium from heavy water, the physico-chemical method of catalytic isotope exchange in the «liquid water – hydrogen» system using the hydrophobic catalyst RCTU-3SM has proven to be very effective. This method allows the process to be carried out at moderate temperatures and pressures in column-type apparatuses. The activity of the catalyst directly affects of the process; accordingly, the higher it is, the greater the productivity of separation units.

EVIO (Combined Electrolysis, Catalytic Exchange) pilot plant has been operating without replacing the catalyst for almost 30 years. According to the regulations, the regeneration of catalyst in EVIO installation is carried out by purging the columns with dry nitrogen and heating to 75 °C. However, recently the activity of the catalyst has decreased, resulting in a noticeable decrease in productivity. The authors investigated alternative methods for regenerating the hydrophobic catalyst in a laboratory setup, such as regeneration with hydrogen, oxygen and air. Experiments have shown that pure oxygen and air make it possible to restore the initial activity of the catalyst and even increase it. These conclusions were tested on EVIO pilot plant; as a result it was possible to increase productivity by more than 20 %.

Синяков Матвей Владимирович
НИИ «Курчатовский институт»
Лаборант-исследователь
Москва, пл. Академика Курчатова, 1
Водородная энергетика, электрохимия

Sinyakov Matvey
NRC «Kurchatov Institute»
Laboratory assistant-researcher
Moscow, Russia
Hydrogen energy, electrochemistry
mmatveimatvei4@gmail.com



ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ВОДОРОДНОГО НАСЫЩЕНИЯ ТИТАНОВЫХ КОЛЛЕКТОРОВ ТОКА НА ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЭЛЕКТРОЛИЗЕРА ВОДЫ С ПОМ

*М. В. Синяков^{1,2}, Д. Д. Спасов¹, Р. М. Менишарпов¹, А. А. Засыпкина¹,
Б. В. Иванов¹, Н. И. Иванова¹*

¹НИИ «Курчатовский институт», Москва, Россия

²РХТУ им. Д. И. Менделеева, Москва, Россия

Электролизеры воды с протонообменной мембраной (ПОМ) являются наиболее эффективной технологией получения высокочистого водорода [1]. Титановые коллекторы тока, применяемые в электролизере воды для токоподвода, должны обладать высокой механической прочностью, электропроводностью, транспортными характеристиками и химической нейтральностью. Титан, однако, является гидридообразующим материалом, который поглощает большие количества водорода на катодной стороне электролизера с образованием соединения переменного состава TiH_x [2].

В данной работе исследовалось влияние поверхностных гидридов титана на электрохимические характеристики электролизера воды с ПОМ. Также было проведено детальное рассмотрение всех видов сопротивлений и их зависимость от образованных гидридных фаз. Насыщение титановых

коллекторов тока водородом проводилось методом сорбции из газовой фазы с помощью установки «Атлан» в НИЦ «Курчатовский институт». В результате получены образцы с различной степенью насыщения, которые были исследованы в составе электролизной ячейки в аналогичных условиях. Исследование показало, что воздействие водородом ведет к образованию характерных микротрещин, изменению структуры зерен и пористости поверхности материала, влияя, таким образом, в большей степени на транспортные потери в электролизерах воды с ПОМ. При этом влияние гидридов титана на омические потери электролизной ячейки незначительно и ими можно пренебречь.

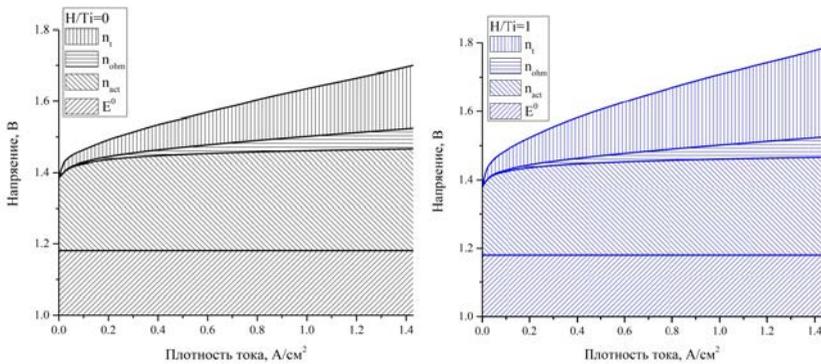


Рис. 1. Вклады различных типов потерь в общее перенапряжении ячейки электролизера

Работа выполнена в рамках государственного задания НИЦ «Курчатовский институт».

ЛИТЕРАТУРА

1. С. А. Григорьев и др. Получение водорода электролизом воды: современное состояние, проблемы и перспек // Транспорт на альтернативном топливе. 2008. № 3 (3). С. 62–69.
2. V. Madina, I. Azkarate. Compatibility of materials with hydrogen. Particular case: Hydrogen embrittlement of titanium alloys // International journal of hydrogen energy. 2009. Т. 34. № 14. С. 5976–5980.

INVESTIGATION OF THE INFLUENCE OF TITANIUM CURRENT COLLECTORS CHARGED WITH HYDROGEN ON PERFORMANCE OF WATER ELECTROLYZER WITH PEM

*M. V. Sinyakov^{1,2}, D. D. Spasov¹, R. M. Mensharapov¹, A. A. Zasypkina¹,
B. V. Ivanov¹, N. A. Ivanova¹*

¹NRC «Kurchatov Institute», Moscow, Russia

²MUCTR, Moscow, Russia

Water electrolyzers with proton exchange membrane (PEM) are the most efficient technology for the production of high-purity hydrogen [1]. In order to ensure the optimal functioning of water electrolyzers, it is essential that the titanium current collectors employed in these devices possess a high degree of mechanical strength, electrical conductivity, transport characteristics and chemical neutrality. Titanium, however, is a hydride-forming material that absorbs large amounts of hydrogen at the cathode side of the electrolyzer to form a compound of variable composition TiH_x [2].

This work investigated the influence of surface titanium hydrides on the performance of a water electrolyzer with PEM. A detailed consideration of all kinds of resistances and their dependence on the formed hydride phases was also carried out. Saturation of titanium current collectors with hydrogen was carried out by the method of sorption from the gas phase using the «AtlaN» unit in the NRC «Kurchatov Institute». As a result, samples exhibiting varying degrees of saturation were procured and subjected to examination as part of an electrolysis cell operated within analogous conditions. The findings of the study indicated that hydrogen exposure resulted in the emergence of characteristic microcracks, alterations in the grain structure and porosity of the material surface. These observations have a significant impact on the transport losses of the water electrolyzer with PEM. Concurrently, the impact of titanium hydrides on ohmic losses in the electrolysis cell is negligible and can be disregarded.

The work was carried out within the state assignment of National Research Center «Kurchatov Institute».

REFERENCES

1. Grigor'ev S. A. et al. Electrolysis of water in a system with a solid polymer electrolyte at elevated pressure // Russian Journal of Electrochemistry. – 2001. T. 37. C. 819–822.
2. V. Madina, I. Azkarate. Compatibility of materials with hydrogen. Particular case: Hydrogen embrittlement of titanium alloys // International journal of hydrogen energy. 2009. T. 34, № 14. C. 5976–5980.

Слатинская Любовь Сергеевна

Федеральное государственное предприятие
«Всероссийский научно-исследовательский
институт автоматики им. Н. Л. Духова»
(ФГУП «ВНИИА»)
Инженер

Slatinskaya L. S.

The Federal State Unitary Enterprise Dukhov
Automatics Research Institute (VNIIA)
Engineer

skrepka3011@mail.ru

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРИТИЯ
В ПРОИЗВОДСТВЕННЫХ ОТХОДАХ, ОБРАЗУЮЩИХСЯ
ПРИ ИЗГОТОВЛЕНИИ НЕЙТРОННЫХ ТРУБОК**

Л. С. Слатинская

Федеральное государственное предприятие «Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова»
(ФГУП «ВНИИА»)

Цель исследования – предложение способа барботирования для определения содержания малых количеств трития в радиоактивных отходах. Рассматриваемый способ является неразрушающим и позволяет извлекать обратно связанный тритий из всего объема отходов. Работа является первым этапом исследования и посвящена определению эффективности поглощения трития накопительными емкостями установки барботирования из физической модели, имитирующей радиоактивный отход, которая представляют собой бязевую салфетку, смоченную тритированной водой известной активности. На основе полученных данных определены оптимальные условия проведения анализа методом барботирования и рассчитан поправочный коэффициент, позволяющий определить остаточное содержание трития в отходах для их сортировки по категориям в соответствии с ОСПОРБ-99-2010.

**TRITIUM CONTENT DETERMINATION IN WASTE GENERATED
DURING NEUTRON TUBES FOR TRITIUM GENERATORS
MANUFACTURE**

L. S. Slatinskaya

The Federal State Unitary Enterprise Dukhov Automatics Research Institute
(VNIIA)

The aim of the study is to propose a bubbling method for the determination of small amounts of tritium holding in waste. The method under consideration is non-destructive and allows the recovery of reversibly bound tritium from the entire waste bulk.

The article is the first stage of research and is devoted to determination of the efficiency of tritium absorption with accumulators of a barbotage unit released by a physical model imitating radioactive waste – a calico cloth moistened with tritiated water of known activity. On the basis of the obtained data the better conditions for analysis by bubbling method were determined and the correction factor was calculated, which allows to determine the residual tritium content in waste for its sorting into waste categories according to national rules and regulations.

Смирнова Екатерина Витальевна
ФТИ им. А. Ф. Иоффе
Лаборант
Санкт-Петербург, ул. Политехническая, 26
Лазерная диагностика первой стенки токамака

Smirnova Ekaterina
Ioffe Institute
Research assistant
St. Petersburg, Polytechnical, 26
Laser diagnostics of tokamak first wall
evsmirnova@mail.ioffe.ru



КОЛИЧЕСТВЕННЫЙ АНАЛИЗ СОДЕРЖАНИЯ ИЗОТОПОВ ВОДОРОДА В МАТЕРИАЛАХ ПЕРВОЙ СТЕНКИ ТОКАМАКА МЕТОДОМ ОПТИЧЕСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ПЕННИНГОВСКОГО РАЗРЯДА

*Е. В. Смирнова^{1,3,4}, О. С. Медведев^{1,2}, А. Г. Раздобарин^{1,3}, Д. И. Елец^{1,2,3},
Л. А. Снигирев^{1,3}, Я. Р. Шубин^{1,3,4}*

¹Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе, Санкт-Петербург

²Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»,
Москва

³Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

⁴Национальный исследовательский университет ИТМО, Санкт-Петербург

Термоядерные реакторы, такие как ITER, обладают режимами работы с дейтерий-тритиевой смесью в качестве топлива. Накопление изотопов водорода в конструкционных материалах и пересаженных слоях является актуальной проблемой при эксплуатации термоядерных реакторов. Тритий – это радиоактивный элемент, синтезируемый промышленным путем, и его удержание в реакторе приводит к нарушению норм безопасности персонала и снижению экономической эффективности. Также в процессе термоядерного синтеза первая стенка нагревается до высоких температур, что приводит к десорбированию накопленного топлива в вакуумный объем и нарушению начального соотношения смеси газов.

В качестве диагностики накопления изотопов водорода часто применяют термодесорбционную спектроскопию (TDS) и анализ ядерных реакций. Однако они требуют разгерметизации системы, что приводит к значительным временным и финансовым затратам. На данный момент разрабатываются дистанционные методы оценки накопления изотопов водорода – лазерно-индуцированную десорбцию (LID) и лазерно-индуцированную абляцию (LIA). В работе [1] была доказана эффективность LID совместно с квадрупольной масс-спектрометрией (QMS), в связи с чем метод LID-QMS апробирован для ITER.

Помимо масс-спектрометрии можно применять оптические методы для анализа остаточных газов. Один из таких методов контроля — это оптическая спектроскопия разряда Пеннинга [2]. Предварительная калибровка позволяет проводить количественный анализ, поскольку интенсивность линий зависит от концентрации частиц в объеме. Преимущество данного метода заключается в возможности регистрации изотопов водорода независимо от их химического состава (например, HDO, C_xD_y и т. д.). При QMS анализе необходимо отслеживать большее количество масс, что усложняет процедуру калибровки и последующей интерпретации результатов при количественном анализе.

В данной работе сравниваются методы регистрации – QMS и оптическая спектроскопия разряда Пеннинга – для количественного анализа накопления изотопов водорода при лазерной абляции исследуемой поверхности. В качестве образцов были выбраны обращенные к плазме элементы из области дивертора токамака Глобус-M2 с углеводородными осадениями.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда 22-12-00360, <https://rscf.ru/project/22-12-00360/>.

ЛИТЕРАТУРА

1. V. Philipps et al. J. Nuclear fusion 53.9 (2013) 093002.
2. E. E. Mukhin et al. J. Nuclear Fusion 56.3 (2016) 036017.

A QUANTITATIVE ANALYSIS OF HYDROGEN ISOTOPE RETENTION IN TOKAMAK FIRST WALL MATERIALS BY PENNING DISCHARGE OPTICAL SPECTROSCOPY

E. V. Smirnova^{1,3,4}, *O. S. Medvedev*^{1,2}, *A. G. Razdobarin*^{1,3}, *D. I. Elets*^{1,2,3},
L. A. Snigirev^{1,3}, *I. R. Shubin*^{1,3,4}

¹A. F. Ioffe Physicotechnical Institute, Russian Academy of Sciences,
St. Petersburg

²National Research Nuclear University «MEPhI», Moscow

³St. Petersburg University, St. Petersburg

⁴National Research University ITMO, St. Petersburg

Thermonuclear reactors like ITER have a mode of operation using a deuterium-tritium mixture as a fuel. Hydrogen isotopes can retention in construction materials and deposited layers. Tritium is a radioactive element which synthesist by industrial production. Tritium retention in reactors leads to a violation of personnel safety and reduces economic efficiency. Another issue is the desorption of hydrogen isotopes in the vacuum chamber during the fusion process, which can disrupt the initial ratio of the gas mixture.

Thermal desorption spectroscopy (TDS) and nuclear reaction analysis are often used for detection of hydrogen isotopes retention. However, to carry out the analysis, it is necessary to vent the vacuum system, and this leads to large time and financial costs. Now the distance methods of hydrogen isotopes retention, laser induced desorption (LID) and laser induced ablation (LIA), are being developing. LID effectiveness with quadrupole mass-spectrometry (QMS) was proved in [1], because of that this method will used in ITER.

Except for mass spectrometry, optical methods are also used for residual gas analysis. One such method is Penning discharge optical spectroscopy [2]. A quantitative analysis could be carried out with an advance calibration because the line intensity is depended on atoms concentration in volume. The registration of hydrogen isotopes is independent of the chemical composition of the materials (for example, HDO, CxDy, etc.), and this is an advantage of the optical method. QMS analysis demand to track a large number of masses, and calibration is necessary for each registered mass, which makes further quantitative analysis more complicated.

QMS analysis and Penning discharge optical spectroscopy was compared in this presentation for the quantitative analysis of hydrogen isotopes from ab-

lated materials by laser irradiation. Divertor elements with hydrocarbons deposition from Globus-M2 tokamak was used as samples for research.

This work was supported by RSF grant No 22-12-00360.

REFERENCES

1. V. Philipps et al. J. Nuclear fusion 53.9 (2013) 093002.
2. E. E. Mukhin et al. J. Nuclear Fusion 56.3 (2016) 036017.

Кучеров О. А.

АО «Высокотехнологический научно-исследовательский институт неорганических материалов им. акад. А. А. Бочвара»,
Москва, Россия
Инженер II категории

OsaKucherov@bochvar.ru

ИСПЫТАНИЕ БЛОКА ХИМИЧЕСКОЙ КОНВЕРСИИ ОКИСЛЕННЫХ ФОРМ ТРИТИЯ В СИСТЕМЕ ГАЗООЧИСТКИ ИЖСР

*О. А. Кучеров¹, А. С. Аникин¹, В. Р. Тарасов¹, Р. В. Чекушин¹,
А. В. Лизунов¹, А. А. Семенов¹, М. И. Беляков¹, Н. Е. Забирова¹,
А. С. Голенок¹, А. Н. Букин^{1,2}, Е. В. Козлова¹*

¹АО «Высокотехнологический научно-исследовательский институт неорганических материалов им. акад. А. А. Бочвара», Москва

²Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, Москва

В ходе работы жидкосолевого реактора образуются газовые продукты деления, в том такие как: изотопы благородных газов криптона и ксенона, радиоактивный изотоп водорода тритий (Т) и его окисленные формы: НТО и ТF. Они требуют безопасного извлечения из топливного контура, с последующей утилизацией. Основным источником трития является реакция захвата нейтронов литием, входящем в состав топливной соли [1]. Тритий и другие изотопы водорода может диффундировать в конструкционные материалы, что может привести к вызванному водородом охрупчиванию и увеличению содержания трития в воздухе вокруг реакторной установки [2].

Для решения данной проблемы мы выдвинули гипотезу, что ряд металлов может восстанавливать НТО и Н(Т)F до НТ, с целью его выделения в контролируемых условиях.

В качестве металлов-восстановителей были выбраны: гранулированный цинк, алюминий, марганец в виде кусков металла, сплав Zr-Co и Mg в стружке. В качестве источника воды использовался реактор, наполненный

катализатором Pt/ γ -Al₂O₃ (5 %) для образования воды из H₂ и O₂. Фтороводород подавался в установку в составе газовой смеси с гелием.

Целью настоящей работы является выбор оптимального металла, способного восстанавливать тритий из окисленных форм: НТО, Н(Т)F. Для выполнения данной цели нам необходимо решить ряд поставленных задач: установление кинетических зависимостей, по построенным изобарам, изучение активности металлов при контакте с водой, сухим и влажным HF.

При проведении экспериментов контроль влажности газового потока осуществлялся с помощью гигрометров. Контроль температур осуществлялся при помощи термоэлектрических преобразователей. Контроль концентрации HF на выходе из установки осуществлялся с применением электрохимического метода: при помощи фторселективного электрода, хлорсеребряного электрода сравнения, размещенных в растворе фосфатного буфера, БРОИСа и бидистиллированной воды [3].

В ходе исследования экспериментальным путем были получены новые данные, отсутствующие в литературных источниках по восстановительной активности ряда металлов, которые подтверждают теоретические расчеты. Выбран оптимальный металл для реактора восстановителя им оказался Mg фракции – стружка, коммерчески доступный продукт.

ЛИТЕРАТУРА

1. P. Calderoni, P. Sharpe, M. Hara, Y. Oya. (2008). Measurement of tritium permeation in flibe (2LiF–BeF₂). *Fusion Engineering and Design*, 83(7-9), 1331–1334.
2. Р. А. Лидин. Неорганическая химия в реакциях. Дрофа, 2007.
3. Agbenyegah, Gordon. Mechanism and Kinetics of Hydrogen Fluoride Capture with Smelter Grade Alumina. Diss. ResearchSpace@ Auckland, 2019.

Юхимчук Александр Аркадьевич

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

Ведущий инженер-исследователь
607190, Россия, г. Саров, пр. Мира, д. 37
Тритиевые технологии,
гидриды металлов, физика
плазмы, изотопы водорода

Yukhimchuk Al. A.

Russian Federal Nuclear Center – All-Russian
Research Institute of Experimental Physics
(RFNC-VNIIEF)

Lead Research Engineer

Sarov, Nizhny Novgorod region,
RU-607190

Tritium technology, hydride of metals, plasma
physic, hydrogen isotopes

arkad@triton.vniief.ru



ТРИТИЕВЫЕ МИШЕНИ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ СВОЙСТВ НЕЙТРОННО-ИЗЫТОЧНЫХ ЯДЕР

*Ал. А. Юхимчук, В. В. Балугев, А. В. Бучирин, Н. Ю. Дьянов,
А. А. Кирдяшкин, И. П. Максимкин, И. Л. Малков, Р. К. Мусяев,
А. А. Юхимчук*

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

Тритиевые криогенные мишени для фрагмент-сепараторов АКУЛИНА и АКУЛИНА-2 разрабатывались, изготавливались и отработывались ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ». Особое внимание при создании тритиевых мишеней уделялось обеспечению норм радиационной безопасности при работе с тритием, что и предопределяло основные конструктивные решения, необходимые испытания и правила эксплуатации мишеней.

Данная работа дает представление об эволюции тритиевых мишеней. В работе описано применение новых конструктивных решений, отвечающих современным требованиям к мишеням; приведена технология изготовления мишеней с металлографическими исследованиями; показан объ-

ем и результаты функциональных и ресурсных испытаний мишеней с нерадиоактивными изотопами водорода.

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

TRITIUM TARGETS FOR STUDY OF NEUTRON-EXCESS NUCLEI PROPERTIES

*Al. A. Yukhimchuk, V. V. Baluev, A. V. Buchirin, N. Yu. Dyanov,
A. A. Kirdyashkin, I. P. Maksimkin, I. L. Malkov, R. K. Musyaev,
A. A. Yukhimchuk*

Russian Federal Nuclear Center – All-Russian Research Institute
of Experimental Physics, Sarov

Tritium cryogenic targets for ACCULINNA and ACCULINNA-2 fragment-separators were developed, manufactured and worked out by FSUE «RFNC-VNIIEF». When creating tritium targets, special attention was paid to ensuring radiation safety standards when working with tritium, which predetermined the main design solutions, the necessary tests and the rules for operating the targets.

The paper describes the application of new design solutions that meet modern requirements for targets; technology of target manufacturing with metallographic research is presented; shows the scope of results of functional and resource tests of targets with non-radioactive hydrogen isotopes.

The study was carried out within the framework of the scientific program of the National Center for Physics and Mathematics, project № 8 «Physics of Hydrogen Isotopes».

Викулов Дмитрий Дмитриевич

ФГБОУ ВО РХТУ им. Д. И. Менделеева

Инженер

Москва, ул. Героев Панфиловцев, д. 20

Разделение изотопов, химический изотопный обмен, гетерогенный катализ

Vikulov Dmitry

D. Mendeleev University of Chemical Technology
of Russia
Engineer

Geroev Panfilovtsev st. 20, Moscow, Russia

Isotope separation, chemical isotope exchange,
heterogeneous catalysis

dmvikul.95@gmail.com



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

*С. А. Харькова, И. А. Вораксо, А. Ю. Чеботов, И. Л. Растунова,
Д. Д. Викулов*

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 хлороформе методом ИК-Фурье спектроскопии, установлены аналитически значимые волновые числа и получены калибровочные уравнения, связывающие интенсивности аналитического сигнала с концентрацией дейтерия.

Приготовление калибровочных растворов дейтерированного хлороформа проводилось путем разбавления CDCl_3 с концентрацией дейтерия 99,8 % ат. в CHCl_3 природного изотопного состава (концентрация дейтерия 0,015 % ат.).

Запись ИК спектров калибровочных растворов производилась на приборе Thermo Scientific Nicolet iS10 с использованием кюветы с флюоритовыми стеклами. Толщина поглощающего слоя 0,015 и 0,025 мм. Использование кюветы с большей толщиной поглощающего слоя позволяет повысить точность определения концентрации дейтерия в наиболее важной для производства дейтерохлороформа области концентраций – >99 % ат. Спектр каждой пробы записывался трехкратно.

Для анализа выбраны волновые числа 3019 см^{-1} (валентные колебания связи C–H), 2253 см^{-1} (валентные колебания связи C–D) и 1216 см^{-1} (деформационные колебания связи C–H). Построить калибровку по линии поглощения, соответствующей деформационным колебаниям связи C–D (914 см^{-1}), с использованием кюветы из флюорита не представляется возможным, так как в этой области спектра CaF_2 не прозрачен. В ходе статистической обработки результатов измерений получены следующие калибровочные зависимости для флюоритовой кюветы с толщиной поглощающего слоя 0,015 мм:

$$[D] = -(244,98 \pm 2,76)A_{3019} + (107,38 \pm 0,66), \quad (1)$$

$$[D] = (511,7 \pm 6,2)A_{2253} - (16,43 \pm 0,62), \quad (2)$$

$$[D] = -(31,65 \pm 1,02)A_{1216} + (103,11 \pm 0,70). \quad (3)$$

Следует отметить, что калибровочные зависимости, полученные для волновых чисел 2253 см^{-1} и 3019 см^{-1} , дают удовлетворительную точность при определении концентрации дейтерия в области от 10 до 90 % ат. При этом зависимость концентрации дейтерия от оптической плотности при волновом числе 1216 см^{-1} подходит для контроля при производстве продуктового дейтерохлороформа.

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

DETERMINATION OF DEUTERIUM CONTENT IN CHLOROFORM BY FTIR SPECTROMETRY IN A WIDE CONCENTRATION AREA

*S. A. Kharkova, I. A. Vorakso, A. Yu. Chebotov, I. L. Rasunova,
D. D. Vikulov*

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia

Deuterated solvents are used to determine the structure of organic compounds by NMR spectroscopy, and also as standard samples for mass spectrometry.

In this work, aimed at developing a technique for determining the deuterium content in chloroform using FTIR spectrometry, analytically significant wave numbers are established and calibration equations are obtained that relate the intensity of the analytical signal to the deuterium concentration.

The preparation of calibration solutions of deuterated chloroform was carried out by diluting CDCl_3 with a deuterium concentration of 99,8 % at. In CHCl_3 of natural isotopic composition (deuterium concentration 0,015 % at.).

IR spectra of calibration solutions were recorded on the device Thermo Scientific Nicolet iS10 using a fluorite glass. The thickness of the absorbing layer was 0,015 and 0,025 mm. The use of a cuvette with a thicker absorbing layer makes it possible to increase the accuracy of determining the deuterium concentration in the most important concentration range for the production of deuteriochloroform – >99 at %. The spectrum of each sample was recorded three times.

The wave numbers chosen for analysis were 3019 cm^{-1} (stretching vibrations of the C-H bond), 2253 cm^{-1} (stretching vibrations of the C-D bond) and 1216 cm^{-1} (bending vibrations of the C-H bond). It is not possible to make a calibration using the absorption line corresponding to the deformation vibrations of the C-D bond (914 cm^{-1}) using a fluorite cuvette, since in this region of the spectrum CaF_2 is not transparent. During statistical processing of measurement results, the following calibration dependencies were obtained for a fluorite cuvette with an absorbing layer thickness of 0,015 mm:

$$[D] = -(244,98 \pm 2,76)A_{3019} + (107,38 \pm 0,66), \quad (1)$$

$$[D] = (511,7 \pm 6,2)A_{2253} - (16,43 \pm 0,62), \quad (2)$$

$$[D] = -(31,65 \pm 1,02)A_{1216} + (103,11 \pm 0,70). \quad (3)$$

It should be noted that the calibration dependences obtained for wave numbers 2253 cm^{-1} and 3019 cm^{-1} provide good accuracy in determining the deuterium concentration in the concentration range from 10 to 90 at.%. Whereas the dependence of deuterium concentration on optical density at a wave number of 1216 cm^{-1} is suitable for control in the production of deuteriochloroform.

The work is performed in the framework of the development program «Priority 2030» of the Mendeleev University of Chemical Technology of Russia.

Вораксо Иван Андреевич

ФГБОУ ВО РХТУ им. Д. И. Менделеева
Ассистент
Москва, ул. Героев Панфиловцев, д. 20
Разделение изотопов,
химический изотопный обмен,
гетерогенный катализ

Vorakso Ivan

D. Mendeleev University of Chemical Technology
of Russia
Assistant
Geroev Panfilovtsev st. 20, Moscow, Russia
Isotope separation, chemical isotope exchange,
heterogeneous catalysis

gorn200@yandex.ru



**ВЛИЯНИЕ СОСТОЯНИЯ МЕМБРАНЫ НА МАССООБМЕННЫЕ
ХАРАКТЕРИСТИКИ ХИМИЧЕСКОГО ИЗОТОПНОГО ОБМЕНА
МЕЖДУ ВОДОЙ И ВОДОРОДОМ В МЕМБРАННЫХ
КОНТАКТНЫХ УСТРОЙСТВАХ**

А. Ю. Чеботов, И. Л. Растунова, И. А. Вораксо, А. С. Попов, А. А. Кузьмин

ФГБОУ ВО РХТУ им. Д. И. Менделеева

Традиционно химический изотопный обмен (ХИО) между водородом и водой проводят в вертикальных насадочных колоннах с послойной или смешанной загрузкой гидрофильной насадки и гидрофобного катализатора. Однако, вследствие контакта жидкой воды с гидрофобным зерном катализатора, такие установки обладают низкой пропускной способностью – линейная скорость парогазового потока не превышает 0,3 м/с [1].

В РХТУ им. Д. И. Менделеева было разработано контактное устройство мембранного типа (КУМТ), где катализатор отделен от воды мембраной, проницаемой для воды и непроницаемой для газа [2]. КУМТ обладают гораздо большей пропускной способностью – линейная скорость может превышать 5 м/с [3], а также в таких устройствах отсутствует требование к гидрофобности катализатора. Процесс массообмена в КУМТ

лимитируется стадиями, связанными с мембраной, поэтому проницаемость мембраны по воде – одна из ее основных характеристик, наряду с механической и радиационной стойкостью [4].

В работе представлены результаты определения проницаемости по воде трех плоских мембран в зависимости от температуры и состояния – МФ-4СК (толщиной 250 мкм), Nafion 117 (183 мкм) и Nafion 212 (50,8 мкм). Показано, что наибольшей проницаемостью обладает наиболее тонкая мембрана Nafion 212. Проведение циклов «модификация-регенерация» позволяет увеличить проницаемость по воде мембран до трех раз, однако это негативно сказывается на их прочностные характеристики.

Также в работе представлены массообменные характеристики ХИО в КУМТ с мембранами МФ-4СК, Nafion 117 и Nafion 212 в зависимости от температуры и состояния мембран. Показано значительное ухудшение массообменных характеристик после «отравления» мембран ионами Fe^{3+} . Регенерация мембран кипячением в растворе азотной кислоты приводит к возвращению коэффициента массопередачи к исходным значениям, а в случае использования мембраны МФ-4СК – к улучшению массообменных характеристик.

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

ЛИТЕРАТУРА

1. Б. М. Андреев, Э. П. Магомедбеков, А. А. Райтман, М. Б. Розенкевич, Ю. А. Сахаровский, А. В. Хорошилов. Разделение изотопов биогенных элементов в двухфазных системах // М.: ИзДАТ, 2003. 376 с.
2. Контактное устройство для изотопного обмена водорода или углекислого газа с водой: пат. 2 375 107. Рос. Федерация. Растунова И. Л., Розенкевич М. Б. № 2008117569/12; заявл. 06.05.2008; опубл. 10.12.2009.
3. И. Л. Растунова, А. Ю. Чеботов, И. А. Вораксо, М. Б. Розенкевич. Изотопный обмен между водородом и водой в контактных устройствах с трубчатыми мембранами // Химическая промышленность сегодня. 2023. № 6. С. 46–51.
4. I. L. Rastunova, A. U. Chebotov, I. A. Vorakso, M. B. Rozenkevich. Mechanism of isotope exchange of hydrogen with water in membrane contact devices // Journal of Physics: Conference Series. 2020. Vol. 1696. P. 012042.

**THE INFLUENCE OF THE MEMBRANE STATE ON THE
MASSTRANSFER CHARACTERISTICS OF CHEMICAL ISOTOPE
EXCHANGE BETWEEN WATER AND HYDROGEN IN MEMBRANE
CONTACT DEVICES**

A. Yu. Chebotov, I. L. Rasunova, I. A. Vorakso, A. S. Popov, A. A. Kuzmin

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia

Traditionally, chemical isotope exchange (ChIE) between hydrogen and water is carried out in vertical packed columns with layer-by-layer or mixed loading of a hydrophilic packing and a hydrophobic catalyst. However, due to the contact of liquid water with the hydrophobic catalyst grain, such installations have low throughput – the linear velocity of the vapor-gas flow does not exceed 0,3 m/s [1].

At the D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia a membrane-type contact device (MCD) was developed, where the catalyst is separated from water by a membrane that is permeable to water and impermeable to gas [2]. MCD have a much higher throughput – the linear velocity can exceed 5 m/s [3], and in such devices there is no requirement for the hydrophobicity of the catalyst. The mass transfer process in MCD is limited by the stages associated with the membrane, therefore the permeability of the membrane to water is one of its main characteristics, along with mechanical and radiation resistance [4].

The paper presents the results of determining the water permeability of three flat membranes depending on temperature and condition – MF-4SK (250 μm thick), Nafion 117 (183 μm) and Nafion 212 (50,8 μm). It is shown that the thinnest membrane Nafion 212 has the greatest permeability. Carrying out modification-regeneration cycles makes it possible to increase the water permeability of membranes up to three times, but this negatively affects their strength characteristics.

The work also presents the mass transfer characteristics of ChIE in MCD with MF-4SK, Nafion 117 and Nafion 212 membranes depending on the temperature and condition of the membranes. A significant deterioration in mass transfer characteristics after «poisoning» of membranes with Fe^{3+} ions was shown. Regeneration of membranes by boiling in a solution of nitric acid leads to the return of the mass transfer coefficient to the original values, and in the case of using the MF-4SK membrane, to an improvement in mass transfer characteristics.

The work is performed in the framework of the development program «Priority 2030» of the Mendeleev University of Chemical Technology of Russia.

REFERENCES

1. B. M. Andreev, E. P. Magomedbekov, A. A. Raitman, M. B. Rozenkevich, Yu. A. Sakharovsky, A. V. Khoroshilov. Separation of Isotopes of Biogenic Elements in Two-Phase Systems. 2007. Elsevier. 303 p.
2. Patent RF No. 2375107. Contact device for isotopic exchange of hydrogen or carbon dioxide with water. Rozenkevich M. B., Rastunova I. L. Bull. No. 3. 2009. (in Russian).
3. I. L. Rasunova, A. Yu. Chebotov, I. A. Vorakso, M. B. Rozenkevich. Isotopic exchange between hydrogen and water in contact devices with tubular membranes // *Khimicheskaya promishlennost' segodnya* [Chemical Industry Today]. 2023. No. 6. P. 46–51. (in Russian).
4. I. L. Rastunova, A. U. Chebotov, I. A. Vorakso, M. B. Rozenkevich. Mechanism of isotope exchange of hydrogen with water in membrane contact devices // *Journal of Physics: Conference Series*. 2020. Vol. 1696. P. 012042.

Пшеницын Михаил Борисович

Российский химико-технологический

университет им. Д. И. Менделеева

Аспирант

125480, Москва, ул. Героев Панфиловцев, д. 20

Технология производства жидкого водорода,

концентрирование дейтерия

Изотопный обмен

Наноматериалы

Pshenitsyn Mikhail

D. Mendeleev University of Chemical Technology
of Russia

Graduate student

125480, Moscow, st. Geroev Panfilovtsev, 20

Liquid hydrogen production technology, deuterium

concentration

Isotopic exchange

Nanomaterials

Pshenmikhail@gmail.com



**ИЗОМЕРНАЯ КОНВЕРСИЯ ПРОТИЯ И ИЗОТОПНЫЙ ОБМЕН
В МОЛЕКУЛЯРНОМ ВОДОРОДЕ НА КАТАЛИТИЧЕСКИХ
СИСТЕМАХ, СОДЕРЖАЩИХ НАНОЧАСТИЦЫ МЕТАЛЛОВ
1-Б ГРУППЫ**

М. Б. Пшеницын, О. А. Боева

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования «Российский химико-технологический университет
им. Д. И. Менделеева»

В настоящее время наноматериалы получают всё большее распространение в науке и промышленности. Это происходит благодаря их уникальным свойствам, которые отличают их от массивных металлов по ряду характеристик. Кроме того, использование наночастиц может быть экономически выгодным. На данный момент области применения наноматериалов ограничены ввиду малой изученности у большинства веществ специфических свойств, появляющихся при уменьшении до наноразмеров.

В данной работе представлены результаты исследований каталитических свойств моно- и биметаллических наночастиц переменного состава на основе меди, серебра и золота в отношении реакции дейтеро-водородного обмена и изомерной конверсии протия.

Исследованы свойства наночастиц состава Cu , Ag , Au , Cu_nAg_m , Ag_mAu_n , Cu_mAu_n (смешанного состава), Au@Ag , Ag@Au , Ag@Cu , Cu@Ag (структуры «ядро-оболочка»). Образцы нанесены на $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$.

Реакции исследованы в широком диапазоне температур при давлении 0,5 Торр, исключая влияние эффектов диффузии на получаемые данные.

Образцы проявили каталитическую активность в отношении как изомерной конверсии протия, так и дейтеро-водородного обмена, в отличие от массивных металлов.

Реакция орто-пара конверсии протия протекала на 1-2 порядка быстрее, чем изотопный обмен, следовательно, с учетом возможных механизмов, конверсия протекает по магнитному механизму, а наночастицы металлов обладают магнитным моментом.

Биметаллические наночастицы, в сравнении с монометаллическими, проявили более высокую активность (разница для отдельных систем достигала 1 порядка), что указывает на возникновение эффекта синергии при объединении в составе наночастицы минимум двух из исследованных металлов.

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

ISOMERIC CONVERSION OF PROTIUM AND ISOTOPE EXCHANGE IN MOLECULAR HYDROGEN ON CATALYTIC SYSTEMS CONTAINING NANOPARTICLES OF METALS OF THE GROUP 1 B

M. B. Pshenitsyn, O. A. Boeva

Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education
«Russian University of Chemical Technology named after D. I. Mendeleev»

Nanomaterials are becoming increasingly prevalent in both science and industry. This is due to their distinctive properties, which differentiate them

from massive metals in a number of ways. Additionally, the utilisation of nanoparticles can be economically advantageous. Currently, the applications of nanomaterials are constrained by the limited study of the specific properties that emerge when substances are reduced to the nanoscale. This work presents the results of studies of the catalytic properties of mono- and bimetallic nanoparticles of variable composition based on copper, silver and gold with respect to the deuterio-hydrogen exchange reaction and isomeric conversion of protium. The properties of Cu, Ag, Au, Cu_nAg_m, Ag_mAu_n, Cu_mAu_n (mixed composition), Au@Ag, Ag@Au, Ag@Cu, Cu@Ag (core-shell structures) nanoparticles were investigated. The samples were deposited on γ -Al₂O₃. The reactions were investigated in a wide temperature range at a pressure of 0,5 Torr, excluding the influence of diffusion effects on the obtained data. The samples demonstrated catalytic activity for both isomeric conversion of protium and deuterio-hydrogen exchange, in contrast to the massive metals.

The ortho-para conversion reaction of protium proceeded at a rate that was 1–2 orders of magnitude faster than isotope exchange. This suggests that the conversion proceeds by a magnetic mechanism, and that the metal nanoparticles possess a magnetic moment.

Bimetallic nanoparticles exhibited higher activity than monometallic nanoparticles. This difference reached 1 order of magnitude in some cases. This indicates that combining at least two of the studied metals in the nanoparticle can result in a synergistic effect.

The research was conducted within the framework of the D. I. Mendeleev Russian Chemical Technology University development programme «Priority-2030».

АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ

Аккузин С. А.	Akkuzin S. A.
Алейников А. Ю.	Aleynikov A. Yu.
Алексеев И. А.	Alekseev I. A.
Алексеев И. Е.	Alekseeva I. E.
Алимов В. Н.	Alimov V. N.
Ананьев С. С.	Ananyev S. S.
Анжигатова Е. Д.	Anzhigatova E. D.
Аникин А. С.	
Аскербеков С. К.	Askerbekov S. K.
Бакулин Д. В.	Bakulin D. V.
Балдин В. Д.	Baldin V. D.
Балуев В. В.	Baluev V. V.
Бирюков А. Н.	Biryukov A. N.
Белова Ю. С.	Belova Yu. S.
Беляков М. И.	
Бердоносова Е. А.	
Бисикало Д. В.	Bisikalo D. V.
Бобырь Н. П.	Bobyry N. P.
Богданова Ю. А.	Bogdanova Yu. A.
Боева О. А.	Boeva O. A.
Бойцов И. Е.	Boitsov I. E.
Бондаренко С. Д.	Bondarenko S. D.
Брык А. А.	Bryk A. A.
Букин А. Н.	Bukin A. N.
Буряк Е. В.	Buryak E. V.
Буснюк А. О.	Busnyuk A. O.
Бучирин А. В.	Buchirin A. V.
Варежкин А. В.	Varezhkin A. V.
Васянина Т. В.	Vasyanina T. V.
Вертей А. В.	Vertey A. V.
Викюлов Д. Д.	Vikulov D. D.
Вихлянцев О. П.	Vikhlyantsev O. P.
Военнов А. В.	Voennov A. V.

Волкова И. Н.	Volkova I. N.
Вораско И. А.	Vorakso I. A.
Вялков М.	Verkhovtsev M.
Голенок А. С.	
Голубева А. В.	Golubeva A. V.
Голубков А. Н.	Golubkov A. N.
Громов Е. П.	Gromov E. P.
Грязнов М. Ю.	Gryaznov M. Yu.
Гуркин А. И.	Gurkin A. I.
Денисов Е. А.	Denisov E. A.
Джунти К.	Giunti C.
Дьянов Н. Ю.	Dyanov N. Yu.
Дмитриев В. А.	Dmitriev V. A.
Дордеи Ф.	Dordei F.
Дугин Д. С.	Dugin D. S.
Егоров А. А.	Egorov A. A.
Елец Д. И.	Elets D. I.
Елишенок А. Б.	Yelishenkov A. B.
Ефимов В. С.	Efimov V. S.
Ефимов С. А.	Efimov S. A.
Забирова Н. Е.	
Загирдинова Э.	Zagirdinova E.
Заика Ю. В.	Zaika Yu. V.
Зарубина Е. Ю.	Zarubina E. Yu.
Заурбекова Ж. А.	Zaurbekova Zh. A.
Засыпкина А. А.	Zasypkina A. A.
Иванов Б. В.	Ivanov B. V.
Иванова Н. И.	Ivanova N. A.
Ивашкин А.	Ivashkin A.
Илькаев Р. И.	Ilkaev R. I.
Кадедду М.	Cadeddu M.
Калинин В. А.	Kalinin V. A.
Канашенко С. Л.	Kanashenko S. L.

Кенжин Е. А.	Kenzhin Ye. A.
Кенжина И. Е.	Kenzhina I. Ye.
Ким А. В.	Kim A. V.
Кирдяшкин А. А.	Kirdyashkin A. A.
Коневец М. В.	Konevets M. V.
Козлов Д. А.	Kozlov D. A.
Козлова Е. В.	Kozlova E. V.
Клямкин С. Н.	
Кобылянский Г. П.	Kobylyansky G. P.
Король А. А.	
Королев В. Ю.	Korolev V. Yu.
Костикова Е. К.	Korolev V. Yu.
Костылева А. А.	Kostikova E. K.
Королев В. Ю.	Kostyleva A. A.
Кочкин В. Н.	Kochkin V. N.
Крат С. А.	Krat S. A.
Кудияров В. Н.	Kudiyarov V. N.
Кузаков К. А.	Kouzakov K. A.
Кузнецов С. Р.	Kuzenov S. R.
Кузьмин А. А.	Kuzmin A. A.
Кузьмин Д. А.	Kuzmin D. A.
Кульсартов Т. В.	Kulsartov T. V.
Курганская А. А.	Kurganskaya A. A.
Кучеров О. А.	
Лазарев Ф.	Lazarev F.
Лившиц А. И.	Livshits A. I.
Лидер А. М.	Lider A. N.
Лизунов А. В.	
Литовченко И. Ю.	Litovchenko I. Yu.
Лю Чж	Liu Zh.
Маклашова И. В.	Maklashova I. V.
Максимкин И. П.	Maksimkin I. P.
Малков И. Л.	Malkov I. L.
Марунич С. А.	Marunich S. A.
Мирохин С. В.	Mitrokhin S. V.
Медведев О. С.	Medvedev O. S.
Мельников С. А.	Melnikov S. A.

Меншарапов Р. М.	Mensharapov R. M.
Моденов М. Ю.	Modenov M. Yu.
Москалев О. А.	Moskalev O. A.
Мусяев Р. К.	Musyaev R. K.
Нецкина О. В.	Netskina O. V.
Осипова В. В.	Osipova V. V.
Пак Ю. С.	Pak Yu. S.
Передистов Е. Ю.	Peredistov E. U.
Персианова А. П.	Persianova A. P.
Першина В. М.	Pershina V. M.
Песня Ю. Е.	Pesnya Yu.
Полехина Н. А.	Polekhina N. A.
Попов А. С.	Popov A. S.
Пшеницын М. Б.	Pshenitsyn M. B.
Раздобарин А. Г.	Razdobarin A. G.
Растунова И. Л.	Rastunova I. L.
Решетников А. А.	Reshetnikov A. A.
Рогожина М. А.	Rogozhina M. A.
Родченкова Н. И.	Rodchenkova N. I.
Родченков Б. С.	Rodchenkov B. C.
Розенкевич М. Б.	Rozenkevich M. B.
Рыжухина А. В.	Ryzhukhina A. V.
Саввотин И. М.	
Санин В. В.	Sanin V. V.
Селиванов А. А.	Selivanov A. A.
Селезнев А. А.	Seleznev A. A.
Семенов А. А.	
Синяков М. В.	Sinyakov M. V.
Слатинская Л. С.	Slatinskaya L. S.
Смирнова Е. В.	Smirnova E. V.
Снигирев Л. А.	Snigirev L. A.
Солнцева Е. Б.	Solntseva E. B.
Сомкина Е. В.	Somkina E. V.
Спасов Д. Д.	Spasov D. D.

Спиридонова К. В.	Spiridonova K. V.
Спицын А. В.	Spitsyn A. V.
Смаль А. С.	Smal A. S.
Степанцов И.	Stepantsov I.
Степанов Н. О.	Stepanov N. O.
Студеникин А.	Studenikin A.
Сураева А. А.	Suraeva A. A.
Тарасов А. А.	Tarasov A. A.
Тарасов В. Р.	Tarasov V. R.
Терёшина И. С.	Tereshina I. S.
Терёшин С. Н.	Tereshin S. N.
Тивикова О. А.	Tivikova O. A.
Трифанов С. А.	Trifonov S. A.
Трофимов В.	Trofimov V.
Ткачев И.	Tkachev I.
Ударцев С. В.	Udartsev S. V.
Федорченко О. А.	Fedorchenko O. A.
Фильчагин С. В.	Filchagin S. V.
Харькова С. А.	Kharkova S. A.
Хапов А. С.	Khapov A. S.
Цой Е. В.	Tsoi E. V.
Чеботов А. Ю.	Chebotov A. Yu.
Чеканов С. В.	Chekanov S. V.
Черкез Д. И.	Cherkez D. I.
Чекушин Р. В.	
Чернов В. М.	Chernov V. M.
Чихрай Е. В.	Chikhray Ye. V.
Чувильдеев В. Н.	Chuvildeev V. T.
Чугров И. А.	Chugrov I. A.
Чуканов А. Н.	Chukanov A. N.
Шаймерденов А. А.	Shaimerdenov A. A.
Шатунов В. Е.	Shatunov V. E.

Шевнин Е. В.	Shevnin E. V.
Шишалова Г. В.	Shishalova G. V.
Шишкова Т. А.	Shishkova T. A.
Шотин С. В.	Shotin S. V.
Шубин Я. Р.	Shubin I. R.
Шутко К. И.	Shutko K. I.
Эльман Р. Р.	Elman R. R.
Юхимчук А. А.	Yukhimchuk A. A.
Юхимчук Ал. А.	Yukhimchuk Al. A.
Яковенко А. А.	Yakovenko A. A.