

АНДАТПА

«8D05308 – Ядролық физика» білім беру бағдарламасы бойынша философия докторы (PhD) дәрежесін алу үшін ұсынылған Толенова Ақтолқын Усербекқызының «Нейтрондық сәулелену жағдайындағы литий метатитанатынан тритийдің пайда болуы мен шығарылуының моделін әзірлеу» тақырыбындағы диссертациялық жұмысына

Диссертациялық жұмыстың жалпы сипаттамасы. Диссертациялық жұмыс нейтрондық сәулелену және терең вакуум жағдайында ${}^6\text{Li}$ изотопымен 96 %-ға дейін байытылған литий метатитанатының (Li_2TiO_3) сфералық үлгілерінен (пэблдерінен) тритийдің генерациясы, тасымалдануы және бөліну процестерін сипаттайтын кешенді математикалық модельді әзірлеуге және верификациялауға арналған. Модель Алматы қаласындағы Ядролық физика институтының ВВР-К зерттеу реакторында *in situ* вакуумдық экстракция әдісімен жүргізілген түпнұсқалық эксперименттік зерттеулердің нәтижелеріне негізделген.

Әзірленген модельдің негізгі ерекшелігі – жеке сфералық үлгі (пэбл) ішіндегі кеңістіктік біртекті емес температуралық өрісті алғаш рет тікелей ескеруі болып табылады. Температуралық өрісті есептеу COMSOL Multiphysics бағдарламалық ортасында ақырлы элементтер әдісімен жүзеге асырылды. Модельдің физикалық негізін реакторлық эксперимент шарттарына жүргізілген нейтрондық-физикалық талдау нәтижесінде анықталған жылу бөлінуі мен тритий генерациясының детерминирленген көлемдік көздері құрайды. Бұл тәсіл тритийдің диффузиясы мен десорбциясының кинетикалық параметрлерін жоғары сенімділікпен анықтауға, материалдағы тритийдің ұсталу уақытын бағалауға және модельді термоядролық реакторлардың бридер аймақтарына жақын пайдалану режимдерінде қолдану мүмкіндігін көрсетуге мүмкіндік берді.

Диссертация тақырыбының өзектілігі. Қоғамның энергияға деген қажеттілігінің үнемі артуы және қазба отындарын ауқымды пайдаланудан туындайтын өткір экологиялық мәселелер жаңа, орнықты және қауіпсіз энергия көздерін іздеуді аса өзекті етеді. Осындай бағыттардың ішіндегі ең перспективалыларының бірі – дейтерий мен тритийдің қосылу реакциясына (D-T реакциясы) негізделген басқарылатын термоядролық синтез.

Оны іске асыру жолындағы негізгі технологиялық мәселе – тритий бойынша отындық өзін-өзі қамтамасыз ету проблемасы болып табылады. Табиғи тритий қорының мардымсыз болуына байланысты тритий термоядролық реактордың өз ішінде, литийқұрамды материалдардың нейтрондармен сәулеленуі нәтижесінде өндірілуі тиіс.

Термоядролық реакторлардың конструкцияларында плазманың белсенді аймағын қоршап орналасқан бланкет маңызды рөл атқарады. Онда нейтрон энергиясын жұту, тритий генерациясы және оны отындық циклге қайтару жүзеге асырылады. Радиациялық төзімділік, термиялық тұрақтылық және тритийдің тиімді бөлінуін қамтамасыз ететін қолайлы диффузиялық

қасиеттерді біріктіретін оңтайлы бридер материалын таңдау – аса маңызды ғылыми-инженерлік міндет.

Перспективалы материалдардың ішінде литий метатитанаты (Li_2TiO_3) ерекше орын алады, ол жоғары химиялық тұрақтылығымен және тритийді салыстырмалы түрде төмен температураларда (200 – 400 °C) тиімді бөлу қабілетімен сипатталады.

EXOTIC, NICU, TEQUILA сияқты халықаралық бағдарламалар аясында жүргізілген ауқымды эксперименттік зерттеулерге қарамастан, бірқатар іргелі мәселелер әлі де толық шешімін таппаған. Атап айтқанда, қолданыстағы көптеген есептік модельдер (DISPL1, MISTRAL, TIARA) жеке түйіршік ішіндегі температуралық өрістің біртекті еместігін ескермейді, бұл жергілікті қыздыру сөзсіз орын алатын нақты реакторлық жағдайларда болжамның дәлдігін төмендетеді. Сонымен қатар, бірқатар перспективалы бланкет конструкцияларына тән терең вакуум жағдайларындағы процестер жеткілікті деңгейде зерттелмеген.

Осыған байланысты, ішкі температуралық градиенттерді ескере отырып, *in situ* сәулелену жағдайында жылуалмасу, тритий генерациясы, диффузиясы және десорбциясы процестерін бір мезгілде сипаттай алатын кешенді модельді әзірлеу өзекті ғылыми-техникалық міндет болып табылады. Мұндай модель бридер материалдарындағы тритийдің мінез-құлқын болжаудың сенімділігін арттыруға және басқарылатын термоядролық синтез технологияларын енгізуді жеделдетуге мүмкіндік береді.

Диссертациялық жұмыстың мақсаты – нейтрондық сәулелену жағдайында кеңістіктік біртекті емес температуралық өрістің әсерін ескере отырып, литий метатитанаты Li_2TiO_3 -тің жеке сфералық үлгісіндегі тритийдің генерациясы, тасымалдануы және бөлінуінің өзара байланысқан процестерін сипаттайтын кешенді математикалық модельді әзірлеу және верификациялау.

Зерттеу міндеттері

Қойылған мақсатқа жету үшін диссертациялық жұмыста келесі міндеттер тұжырымдалып, шешілді:

1. Басқарылатын термоядролық синтездің қазіргі жобаларына, эксперименттік қондырғыларға және зерттеу әдістеріне талдау жүргізу, литий керамикасынан тритийдің генерациясы мен бөлінуі бойынша реакторлық эксперименттердің нәтижелерін жалпылау және эксперименттік деректерді өңдеу мен интерпретациялау тәсілдерін талдау.

2. ВВР-К зерттеу реакторында жоспарланған эксперимент шарттарына нейтрондық-физикалық талдау жүргізу арқылы үлгідегі жылу бөлінуі мен тритий генерациясының детерминирленген көлемдік көздерін анықтау.

3. Тритийдің бөліну кинетикасы бойынша эксперименттік деректерді бастапқы өңдеуге және тиімді кинетикалық параметрлерді бағалауға арналған аналитикалық модельді әзірлеу.

4. COMSOL Multiphysics бағдарламалық ортасында жылу мен массаның тасымалдануының өзара байланысқан процестерін сипаттайтын кешенді сандық модельді әзірлеу.

5. Модельді *in situ* реакторлық эксперимент деректерімен салыстыру арқылы верификациялау, тритий тасымалының кинетикалық параметрлерін (диффузия коэффициенті мен десорбция константасын) анықтау және тритийдің материалдағы ұсталу уақытын бағалау.

6. Верификацияланған модельдің термоядролық реактор бридер материалдарының пайдалану режимдерін модельдейтін жағдайларда тритий мінез-құлқын болжау үшін қолданылу мүмкіндігін көрсету.

Зерттеу объектісі – орташа диаметрі шамамен $1 \pm 0,2$ мм болатын, ${}^6\text{Li}$ изотопымен 96 %-ға дейін байытылған және ВВР-К зерттеу реакторы жағдайында нейтрондармен сәулелендірілген литий метатитанаты Li_2TiO_3 -тің сфералық үлгілері (пэбблдер).

Зерттеу пәні – нейтрондық сәулелену жағдайында литий метатитанаты Li_2TiO_3 -тегі тритийдің генерациясы, көлемдік диффузиясы және беткі десорбциясы процестерінің механизмдері мен кинетикалық параметрлері, сондай-ақ олардың үлгі ішіндегі кеңістіктік біртекті емес температуралық өріске тәуелділігі.

Зерттеу әдістері

Диссертациялық жұмыста эксперименттік және есептік-теориялық тәсілдерді қамтитын кешенді зерттеу әдістері қолданылды:

- Эксперименттік әдістер: ВВР-К зерттеу ядролық реакторында тікелей іске асырылған *in situ* вакуумдық экстракция әдісі.
- Есептік-теориялық әдістер:
 - жылу бөлінуінің көлемдік көздерін және тритий генерациясының жылдамдығын анықтау үшін нейтрондық-физикалық модельдеу;
 - эксперименттік деректерді бастапқы өңдеу үшін қолданылатын тритий бөліну кинетикасын аналитикалық модельдеу;
 - COMSOL Multiphysics бағдарламалық кешенінде ақырлы элементтер әдісімен жылу мен массаның тасымалдануының өзара байланысқан есептерін сандық модельдеу.

Қорғауға ұсынылатын негізгі қағидалар:

1. Вакуум және нейтрондық сәулелену жағдайында ${}^6\text{Li}$ изотопымен ~96 % деңгейіне дейін байытылған литий метатитанаты Li_2TiO_3 -тің жеке сфералық үлгісінде (пэбблде) тритийдің генерациясы, тасымалдануы және бөліну процестерін сипаттайтын кешенді математикалық модель әзірленді. Осы қойылым шеңберінде үлгі ішінде қалыптасатын кеңістіктік біртекті емес температуралық өрістің әсері алғаш рет ескерілді. Модельдің сандық іске асырылуы COMSOL Multiphysics бағдарламалық кешенінде жүзеге асырылды және ВВР-К зерттеу реакторындағы эксперимент шарттарына жүргізілген нейтрондық-физикалық талдау аясында есептелген тритий генерациясы мен жылу бөлінуінің детерминирленген көлемдік көздеріне негізделген:

- ${}^6\text{Li}(n, \alpha)\text{T}$ экзотермиялық реакциясымен шартталған жылу бөлінуінің көлемдік көзі: $q_{\text{gen}}(t) = 187,1 \cdot \frac{W(t)}{W_0}$ Вт/см³;
- ол реакция нәтижесінде пайда болатын тритий генерациясының көлемдік көзі: $G_T(t) = 8,64 \times 10^{-10} \cdot \frac{W(t)}{W_0}$ моль/(см³ · с)

мұнда $W(t)$ – реактордың ағымдағы қуаты, $W_0 = 6$ МВт.

2. In situ реакторлық эксперимент деректері бойынша модельді верификациялау нәтижесінде литий метатитанаты Li_2TiO_3 -тегі тритийдің диффузия коэффициенті анықталып, ол аррениустық тәуелділікпен сипатталды:

$$D = 3 \times 10^{-8} \exp\left(-\frac{72 \text{ кДж/моль}}{RT}\right) \text{ м}^2/\text{с}$$

Алынған мән материалдағы тритийдің көлемдік тасымалдануына тән уақыттық масштабты анықтайды.

3. Li_2TiO_3 бетінде тритийдің десорбциясының жылдамдық константасы анықталды және ол келесі түрде өрнектеледі:

$$K_{\text{des}} = 1,2 \times 10^{-6} \exp\left(-\frac{52 \text{ кДж/моль}}{RT}\right) \text{ м}^2/(\text{моль} \cdot \text{с})$$

Диффузия коэффициентімен бірлесе отырып, бұл параметр материалдағы тритийдің ұсталу уақытын анықтауға мүмкіндік береді, ол 600 °C температурада шамамен $\sim 10^4$ с құрайды және температура 900 °C-қа дейін артқанда $\sim 10^3$ с-қа дейін төмендейді.

Жұмыстың ғылыми жаңалығы:

1. Li_2TiO_3 литий метатитанатының жеке сфералық үлгісі (пэбблы) үшін жылулық және диффузиялық процестерді сипаттайтын түпнұсқалық кешенді модель әзірленіп, іске асырылды. Модельдің принциптік ерекшелігі – үлгі ішіндегі температуралық өрістің кеңістіктік біртекті еместігін ескеруі болып табылады. Модель ВВР-К зерттеу реакторында жүргізілген нақты эксперимент шарттарына арналған нейтрондық-физикалық талдау аясында есептелген жылу бөлінуі мен тритий генерациясының детерминирленген көлемдік көздеріне негізделген.

2. In situ эксперимент деректері бойынша модельді верификациялау шеңберінде Li_2TiO_3 материалындағы тритий тасымалының іргелі кинетикалық параметрлері алғаш рет анықталды. Диффузия процесі үшін алдын ала экспоненциалды көбейткіш $D_0 = (3,0 \pm 0,15) \times 10^{-8} (\text{м}^2/\text{с})$ және активация энергиясы $E_d = (72 \pm 1) \text{ кДж/моль}$ анықталды. Десорбция процесі үшін алдын ала экспоненциалды көбейткіш $K_0 = (1,20 \pm 0,06) \times 10^{-6} (\text{м}^2/\text{моль} \cdot \text{с})$ және активация энергиясы $E_{\text{des}} = (52 \pm 1) \text{ кДж/моль}$ анықталды.

3. Алынған параметрлер негізінде реакторлық сәулелену жағдайларын модельдейтін режимдерде материалдағы тритийдің ұсталу уақытына алғашқы сандық бағалау жүргізілді. Температураның 600 °C ($\sim 10^4$ с)

мәнінен $900\text{ }^{\circ}\text{C}$ ($\sim 10^3\text{ c}$) мәніне дейін артуымен аталған параметрдің шамамен бір реттік тәртіпке төмендейтіні көрсетілді, бұл бридер аймақтарының жұмысын болжау үшін маңызды мәнге ие.

Жұмыстың практикалық маңыздылығы әзірленген модельді ИТЭР және DEMO сияқты перспективалы термоядролық реакторлардың бланкеттерінің жұмыс істеу жағдайларында литий метатитанатының (Li_2TiO_3) мінез-құлқын болжау үшін қолдану мүмкіндігімен айқындалады. Алынған кинетикалық параметрлер мен модельдеу әдістемесі бридер аймақтарының конструктивтік және пайдалану параметрлерін оңтайландыруда, соның ішінде үлгілердің оңтайлы өлшемдерін және олардың жылулық жүктеме режимдерін таңдауда пайдаланылуы мүмкін. ИТЭР-дің базалық сценарийі үшін жүргізілген есептеулер реактордың тритий бойынша толық өзін-өзі қамтамасыз етуі оның жұмыс істеуінің 24 циклінен кейін-ақ қамтамасыз етілетінін көрсетті.

Алынған нәтижелердің дұрыстығы мен негізділігі жоғары импакт-факторлы рецензияланатын шетелдік ғылыми журналдарда жарияланған еңбектермен, Қазақстан Республикасы Ғылым және жоғары білім министрлігінің Ғылым және жоғары білім саласындағы сапаны қамтамасыз ету комитеті ұсынған басылымдардағы жарияланымдармен, сондай-ақ жақын және алыс шетелдердің халықаралық ғылыми конференцияларының еңбектерінде баяндалуымен расталады.

Автордың жеке үлесі нейтрондық сәулелену жағдайында Li_2TiO_3 литий керамикасындағы тритийдің генерациясы, тасымалдануы және бөліну процестерін сипаттауға арналған кешенді модельдік тәсілді қалыптастыру мен іске асырудан тұрады. Автор жылу бөлінуі мен тритий генерациясының көлемдік көздерін нейтрондық-физикалық тұрғыдан сипаттауды COMSOL Multiphysics бағдарламалық кешенінде ақырлы элементтер әдісімен жылу-массалық тасымалды сандық модельдеумен біріктіретін математикалық модельді әзірлеп, оны верификациялады. Модельдің сезімталдық талдауы жүргізіліп, үлгі ішіндегі кеңістіктік біртекті емес температуралық өрісті ескере отырып, тритий тасымалының басым механизмдері анықталды, сондай-ақ *in situ* реакторлық эксперимент деректері бойынша нәтижелердің верификациясы орындалды. Зерттеу міндеттерін тұжырымдау, алынған нәтижелерді талқылау және олардың физикалық интерпретациясы ғылыми консультанттармен бірлесе отырып жүзеге асырылды.