АННОТАЦИЯ

к диссертационной работе Толеновой Ақтолқын Усербекқызы
«Разработка модели генерации и выделения трития из метатитаната лития в условиях нейтронного облучения», представленной на соискание степени доктора философии (PhD) по образовательной программе
«8D05308 – Ядерная физика»

Общая характеристика диссертационной работы. Диссертационная работа посвящена разработке и верификации комплексной математической модели процессов генерации, транспорта и выделения трития из сферических образцов (пэбблов) метатитаната лития (Li_2TiO_3), обогащённого по изотопу ^6Li до 96 %, в условиях нейтронного облучения и глубокого вакуума. Модель основана на результатах оригинальных экспериментальных исследований, выполненных методом in situ вакуумной экстракции на исследовательском реакторе ВВР-К (ИЯФ, г. Алматы).

Ключевой особенностью разработанной модели является впервые реализованный учёт пространственно неоднородного температурного поля внутри отдельного сферического образца (пэббла), выполненный методом конечных элементов в программной среде COMSOL Multiphysics. Физической основой модели послужили детерминированные объёмные источники тепловыделения и генерации трития, определённые на основе нейтронно-физического анализа условий реакторного эксперимента. Это позволило с высокой степенью достоверности определить кинетические параметры диффузии и десорбции трития, оценить время его удержания в материале и продемонстрировать возможность применения модели для прогнозирования поведения трития в условиях, приближённых к эксплуатационным режимам бридерных зон термоядерных реакторов.

Актуальность темы диссертации. Растущие энергетические потребности общества и острые экологические проблемы, вызванные масштабным использованием ископаемого топлива, делают крайне актуальным поиск новых, устойчивых и безопасных источников энергии. Одним из наиболее перспективных направлений является управляемый термоядерный синтез (УТС), основанный на реакции слияния дейтерия и трития (D-T реакция).

Ключевым технологическим вызовом на пути его реализации остаётся проблема топливной самодостаточности по тритию. Поскольку природные запасы трития ничтожны, он должен воспроизводиться непосредственно внутри термоядерного реактора в результате ядерных реакций при облучении литийсодержащих материалов нейтронами.

В конструкциях термоядерных реакторов критическую роль играет бланкет – модуль, окружающий активную зону плазмы. В нём происходит поглощение энергии нейтронов, генерация трития и его извлечение для рециркуляции в топливный цикл. Выбор оптимального материала-бридера, сочетающего радиационную стойкость, термическую стабильность и

эффективные диффузионные характеристики для выделения трития, является первостепенной задачей. Среди перспективных кандидатов особое место занимает метатитанат лития (Li_2TiO_3), отличающийся хорошей химической стабильностью и способностью эффективно высвобождать тритий при умеренных температурах ($200 - 400\ °C$).

Несмотря на значительный объём экспериментальных исследований в рамках международных программ (EXOTIC, HICU, TEQUILA), ряд фундаментальных вопросов остаётся открытым. В частности, большинство используемых расчётных моделей (DISPL1, MISTRAL, TIARA) не учитывают неоднородность температурного поля внутри отдельной гранулы материала, что существенно снижает точность прогнозирования в реальных условиях работы реактора, где локальный нагрев неизбежен. Кроме того, недостаточно изучены процессы в условиях глубокого вакуума, характерных для ряда перспективных конструкций бланкетов.

Таким образом, актуальной научно-технической задачей является разработка комплексной модели, способной одновременно учитывать процессы теплопереноса, генерации трития, его диффузии и десорбции в условиях in-situ облучения с учётом внутренних температурных градиентов. Создание такой модели позволит повысить надёжность прогнозирования поведения трития в бридерных материалах и ускорить внедрение технологий УТС.

Целью диссертационной работы является создание и верификация комплексной математической модели сопряжённых процессов генерации, переноса и выделения трития в единичном сферическом образце метатитаната лития Li_2TiO_3, учитывающей влияние пространственно неоднородного температурного поля при нейтронном облучении.

Для достижения поставленной цели в диссертационной работе были сформулированы и решены **следующие задачи**:

1. Провести анализ современных проектов управляемого термоядерного синтеза, экспериментальных установок и методов исследования, а также обобщить результаты реакторных экспериментов по генерации и выделению трития из литиевой керамики и проанализировать существующие подходы к обработке и интерпретации экспериментальных данных.
2. Выполнить нейтронно-физический анализ условий планируемого эксперимента на исследовательском реакторе ВВР-К с целью определения детерминированных объёмных источников тепловыделения и скорости генерации трития в образце.
3. Разработать аналитическую модель, предназначенную для первичной обработки экспериментальных данных по кинетике выделения трития и оценки эффективных кинетических параметров процесса.
4. Разработать комплексную численную модель сопряжённых процессов тепломассопереноса в единичном образце литиевой керамики Li_2TiO_3 в программной среде COMSOL Multiphysics на основе детерминированных объёмных источников тепла и генерации трития.

5. Выполнить верификацию разработанной модели путём сопоставления результатов численного моделирования с данными реакторного эксперимента in situ, определить кинетические параметры переноса трития (коэффициент диффузии и константу десорбции), а также оценить характерное время удержания трития в материале.

6. Продемонстрировать применимость верифицированной модели для выполнения прогнозных расчётов поведения трития в условиях, моделирующих эксплуатационные режимы бридерных материалов термоядерных реакторов.

Объектом исследования являются сферические образцы метатитаната лития Li_2TiO_3 (пэбблы) со средним диаметром ~1±0,2 мм, обогащённые по изотопу ^6Li до 96%, облучённые нейтронами в условиях исследовательского реактора ВВР-К.

Предметом исследования являются механизмы и кинетические параметры процессов генерации, объёмной диффузии и поверхностной десорбции трития в метатитанате лития Li_2TiO_3 при нейтронном облучении, а также их зависимость от пространственно неоднородного температурного поля внутри сферического образца.

Методы исследования:

В диссертационной работе применён комплекс расчётно-экспериментальных методов, включающий экспериментальные и расчётно-теоретические подходы.

• Экспериментальные методы: in situ метод вакуумной экстракции трития, реализованный непосредственно на исследовательском ядерном реакторе ВВР-К.

• Расчётно-теоретические методы:

- нейтронно-физическое моделирование для определения объёмных источников тепловыделения и скорости генерации трития;

- аналитическое моделирование кинетики выделения трития, применяемое для первичной обработки экспериментальных данных;

- численное моделирование сопряжённых задач тепломассопереноса методом конечных элементов в программном комплексе COMSOL Multiphysics.

Положения, выносимые на защиту:

1. Разработана комплексная математическая модель процессов генерации, переноса и выделения трития в единичном сферическом образце (пэббле) метатитаната лития Li_2TiO_3, обогащённого по изотопу ^6Li до ~96 %, в условиях вакуума и нейтронного облучения. Впервые в рамках данной постановки учтено пространственно неоднородное температурное поле, формируемое в образце. Численная реализация выполнена в программном пакете COMSOL Multiphysics и основана на детерминированных объёмных источниках генерации трития и тепловыделения, рассчитанных в рамках нейтронно-физического анализа условий эксперимента на исследовательском реакторе ВВР-К:

– объёмный источник тепловыделения, обусловленный экзотермической реакцией ${}^6Li(n,\alpha)T$: $q_{\text{gen}}(t) = 187{,}1 \cdot \frac{W(t)}{W_0}$ Вт/см^3;
– объёмный источник генерации трития от той же реакции:

$$G_T(t) = 8{,}64 \times 10^{-10} \cdot \frac{W(t)}{W_0} \text{ моль/(см}^3 \cdot \text{с)}$$

где $W(t)$ – текущая мощность реактора, $W_0 = 6$МВт.

2. По результатам верификации модели данными реакторного эксперимента in situ определён коэффициент диффузии трития в метатитанате лития Li_2TiO_3, описываемый аррениусовской зависимостью:

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

Полученное значение определяет характерное время объёмного переноса трития в материале.

3. Определена константа скорости десорбции трития с поверхности Li_2TiO_3, имеющая вид:

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

Совместно с коэффициентом диффузии данный параметр позволяет определить время удержания трития в материале, которое составляет $\sim 10^4$ с при $600°C$ и снижается до $\sim 10^3$ с при $900°C$.

Научная новизна работы:

1. Создана и реализована оригинальная комплексная модель тепловых и диффузионных процессов для одиночного сферического образца (пэббла) Li_2TiO_3, принципиальным отличием которой является учёт пространственной неоднородности температурного поля внутри образца. Модель построена на детерминированных данных – объёмных источниках тепловыделения и генерации трития, рассчитанных в рамках нейтронно-физического анализа конкретных условий эксперимента на исследовательском реакторе ВВР-К.

2. В рамках верификации модели по данным in-situ эксперимента впервые определены фундаментальные кинетические параметры переноса трития в Li_2TiO_3. Для диффузии установлены: предэкспоненциальный множитель $D_0 = (3{,}0 \pm 0{,}15) \times 10^{-8}$(м^2/с) и энергия активации $\text{E}_d = (72 \pm 1)$кДж/моль. Для процесса десорбции определены: предэкспоненциальный множитель $K_0 = (1{,}20 \pm 0{,}06) \times 10^{-6}$(м^2/моль $\cdot$ с) и энергия активации $\text{E}_{des} = (52 \pm 1)$кДж/моль.

3. На основе полученных параметров проведена первая количественная оценка времени удержания трития в материале в условиях, моделирующих реакторное облучение. Показано, что данный параметр уменьшается примерно на порядок с повышением температуры от 600 $°C$ ($\sim 10^4$ с) до

900 $°C$ ($\sim 10^3$ с), что имеет важное значение для прогнозирования работы бридерных зон.

Практическая значимость представленной работы состоит в возможности применения разработанной модели для прогнозирования поведения метатитаната лития (Li_2TiO_3) в условиях работы бланкетов перспективных термоядерных реакторов, таких как ИТЭР и DEMO. Полученные кинетические параметры и сама методика моделирования могут быть использованы для оптимизации конструктивных и эксплуатационных параметров бридерных зон, включая выбор оптимальных размеров образцов и режимов их теплового нагрева. Проведенные расчеты для базового сценария ИТЭР показали, что полная самодостаточность реактора по тритию достигается уже после 24 циклов его работы.

Достоверность и обоснованность полученных результатов подтверждаются публикациями в рецензируемых зарубежных научных журналах с высоким импакт-фактором, в изданиях, рекомендованных Комитетом по обеспечению качества в сфере науки и высшего образования МНВО РК, а также в трудах международных научных конференций ближнего и дальнего зарубежья.

Личный вклад автора состоит в формировании и реализации комплексного модельного подхода к описанию процессов генерации, переноса и выделения трития в литиевой керамике Li_2TiO_3 в условиях нейтронного облучения. Автором разработана и верифицирована математическая модель, объединяющая нейтронно-физическое описание объёмных источников тепловыделения и генерации трития с численным моделированием тепломассопереноса методом конечных элементов в программном пакете COMSOL Multiphysics. Автором выполнен анализ чувствительности модели и выявлены доминирующие механизмы переноса трития с учётом пространственно-неоднородного температурного поля внутри образца, а также проведена верификация результатов по данным реакторного эксперимента in situ. Формулировка исследовательских задач, обсуждение и физическая интерпретация полученных результатов осуществлялись совместно с научными консультантами.