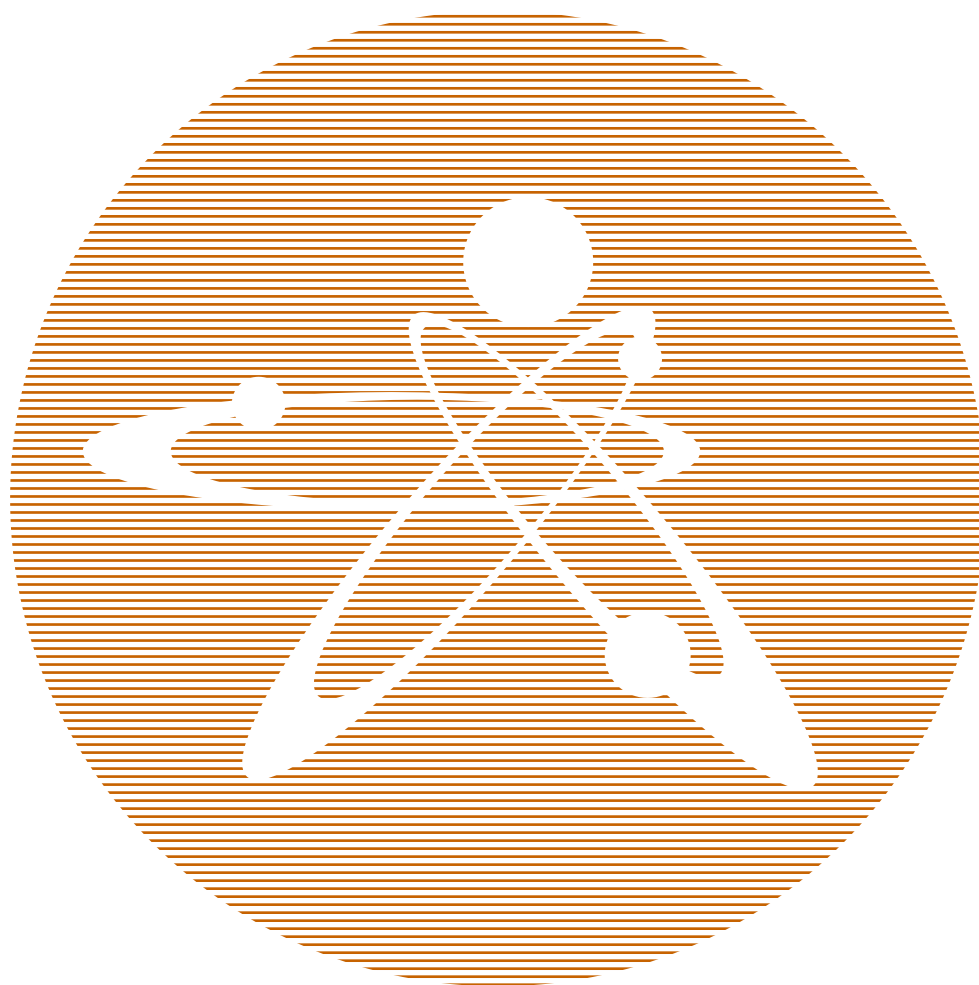


ВЫПУСК 4

ISSN 1729-7516

**ПЕРИОДИЧЕСКИЙ НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ
НАЦИОНАЛЬНОГО ЯДЕРНОГО ЦЕНТРА
РЕСПУБЛИКИ КАЗАХСТАН**

БЕСТИК



Вестник НЯЦ РК

ПЕРИОДИЧЕСКИЙ НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ
НАЦИОНАЛЬНОГО ЯДЕРНОГО ЦЕНТРА РЕСПУБЛИКИ КАЗАХСТАН

ВЫПУСК 4(104), ДЕКАБРЬ 2025

Издается с января 2000 г.

ГЛАВНЫЙ РЕДАКТОР – д.ф.-м.н., профессор БАТЫРБЕКОВ Э.Г.

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ: д.ф.-м.н. СКАКОВ М.К. – заместитель главного редактора,
к.б.н. АЙДАРХАНОВ А.О., д.ф.-м.н. БУРТЕБАЕВ Н.Т., д.т.н. ВЕЛЕБА В. (Польша), к.ф.-м.н. ВИТЮК В.А.,
к.ф.-м.н. ВУРИМ А.Д., д.т.н. ГРАДОБОВЕВ А.В. (Россия), д.ф.-м.н. КОПНИЧЕВ Ю.Ф. (Россия),
д.ф.-м.н. МИХАЙЛОВА Н.Н., д.ф.-м.н. СОКОЛОВА И.Н., д.ф.-м.н. ТАЖИБАЕВА И.Л.,
Prof. Dr. Yoichi FUJII-Е (Япония), PhD Takahiro HAYASHI (Япония)

ҚР ҰЯО Жаршысы

ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ ҰЛТТЫҚ ЯДРОЛЫҚ ОРТАЛЫҒЫНЫҢ
МЕРЗІМДІК ҒЫЛЫМИ-ТЕХНИКАЛЫҚ ЖУРНАЛЫ

4(104) ШЫҒАРЫМ, ЖЕЛТОҚСАН, 2025 ЖЫЛ

NNC RK Bulletin

RESEARCH AND TECHNOLOGY REVIEW
NATIONAL NUCLEAR CENTER OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN

ISSUE 4(104), December 2025

Журнал «Вестник НЯЦ РК» входит в перечень научных изданий, рекомендуемых Комитетом по обеспечению качества в сфере науки и высшего образования Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан для публикации основных результатов научной деятельности.

«ҚР ҰЯО жаршысы» журналы ғылыми қызметтің негізгі нәтижелерін жариялау үшін Қазақстан Республикасы Ғылым және жоғары білім министрлігінің Ғылым және жоғары білім саласындағы сапаны қамтамасыз ету комитеті ұсынған ғылыми басылымдар тізбесіне кіреді.

The Journal “NNC RK Bulletin” is included in the list of scientific publications recommended by Committee for Quality Assurance in the Field of Science and Higher Education of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan for the publication of the main results of scientific activities.

СОДЕРЖАНИЕ

РАЗРАБОТКА И ВЕРИФИКАЦИЯ НЕЙТРОННО-ФИЗИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ РЕАКТОРА APR-1400	
Г. Г. Какимова, Р. А. Иркимбеков, А. С. Сураев	5
АНАЛИЗ РАССЕЯНИЯ α-ЧАСТИЦ И ^3He НА ЯДРАХ ^9Be В ШИРОКОЙ ОБЛАСТИ ЭНЕРГИЙ В РАМКАХ ОПТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ И МЕТОДА СВЯЗАННЫХ КАНАЛОВ	
К. А. Талпакова, Н. Буртебаев, Л. И. Галанина, Маулен Насурлла, С. Б. Сакута, С. К. Сахиев, Маржан Насурлла, Р. А. Ходжаев, Д. А. Исаев, А. Қ. Нұрпейсов, С. А. Турганова.....	12
DEVICE FOR FAST INTERRUPTION OF ACCELERATED ION BEAM AT DC-60 AND IC-100 CYCLOTRONS	
M. V. Koloberdin, I. A. Ivanov, L. Pavlov, A. Isatov, S. Mitrofanov, V. A. Skuratov, M. V. Zdorovets, B. C. Amanzhulov	20
РОЛЬ РАЗМЕРНЫХ ЭФФЕКТОВ И ФАЗОВЫХ ПОЛИМОРФНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В КОМПОЗИТНЫХ КЕРАМИКАХ НА ТЕПЛОИЗОЛЯЦИОННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ И СОПРОТИВЛЯЕМОСТЬ К ВНЕШНИМ ВОЗДЕЙСТВИЯМ	
И. Е. Кенжина, А. Л. Козловский, Ш. Хаметов, П. Блынский.....	29
ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ И ДЕФЕКТОВ НА ЭЛАСТИЧНОСТЬ ДЕФОРМИРОВАННОГО ПРИ РАСТЯЖЕНИИ АЛМАЗА	
Т. М. Инербаев, А. У. Абуова, Ф. У. Абуова, Г. А. Қаптағай, Н. Мерәлі, Ж. К. Зәкиева, Б. М. Сатанова, А. Раскалиев	41
ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕРМОЦИКЛИРОВАНИЯ И СКОРОСТИ НАГРЕВА НА ПОВЕДЕНИЕ МЕТАЛЛИЧЕСКОГО БЕРИЛЛИЯ В ПАРО-АРГОННОЙ СРЕДЕ МЕТОДОМ ТГА	
С. Қ. Әскербеков, Ж. Т. Бұғыбай, Т. В. Кульсартов, Ж. А. Заурбекова, А. М. Аханов, М. Т. Айткулов, А. Б. Елишенков, А. А. Шаймерденов.....	47
РАЗРАБОТКА И АНАЛИЗ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ОБЛУЧАТЕЛЬНОЙ КАПСУЛЫ, ПРЕДНАЗНАЧЕННОЙ ДЛЯ ПРОИЗВОДСТВА МО-99 В РЕАКТОРЕ ВВР-К	
А. Ч. Ашибаев, Д. С. Сайранбаев, А. А. Шаймерденов	55
МХЕНЕ ЖӘНЕ НАНОЦЕЛЛЮЛОЗА НЕГІЗІНДЕГІ КОМПОЗИТТІ МЕМБРАНАЛАР: ҚАСИЕТТЕРІ ЖӘНЕ СУДЫ ТАЗАЛАУДАҒЫ ТИІМДІЛІГІ	
А. Т. Табынбаева, А. Р. Сатаева, Н. А. Ахметов, К. Т. Тастамбек, Ж. Т. Тауанов	65
ОЦЕНКА ВЫДЕЛЕНИЯ ИОНОВ ТРИТИЯ, ОБРАЗУЮЩИХСЯ В ЯДЕРНОЙ РЕАКЦИИ $^6\text{Li}(n, \alpha)\text{T}$ ИЗ ПРИПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ ЛИТИЕВОЙ КЕРАМИКИ В УСЛОВИЯХ РЕАКТОРНОГО ОБЛУЧЕНИЯ	
Т. В. Кульсартов, Д. С. Сайранбаев, М. Т. Айткулов, С. Қ. Әскербеков, А. М. Аханов, А. Б. Елишенков, Ж. А. Заурбекова, А. А. Шаймерденов	79
РАДИАЦИОННАЯ СТОЙКОСТЬ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ ВАНАДИЯ К СЕГРЕГАЦИИ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ ТЯЖЁЛЫМИ ИОНАМИ КРИПТОНА	
И. А. Иванов, Б. С. Аманжулов, В. В. Углов, С. В. Злоцкий, Ә. М. Темір, Ә. Д. Сапар, Е. О. Унгарбаев, Ке Джин, А. Е. Рысқұлов	88
ASSESSMENT OF WATER TREATMENT QUALITY AT THE WATER TREATMENT COMPLEX OF TPP-1 IN THE CITY OF SEMEY	
A. R. Khazhidinova, A. S. Khazhidinov, S. L. Elistratov	100
ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА ДОЗОВОЙ НАГРУЗКИ НА НАСЕЛЕНИЕ ОТ АТМОСФЕРНЫХ ВЫБРОСОВ ПРИ НОРМАЛЬНЫХ УСЛОВИЯХ РАБОТЫ АЭС	
С. П. Левченко, В. В. Божко, П. Е. Кривицкий	107
INVESTIGATION OF STRUCTURE AND PROPERTIES OF COATINGS OBTAINED BY ELECTRIC ARC METALLIZATION AT DIFFERENT WIRE FEED RATES	
B. K. Rakhadilov, D. B. Buitkenov, A. K. Apsezhanova, N. M. Magazov, Ye. S. Molbossynov.....	113

ВВЭР-1000 РЕАКТОРЫНЫҢ ЖБҚ ІШІНДЕ БІРІНШІ ОТЫНДЫҚ ЦИКЛДАН КЕЙІНГІ РАДИО- НУКЛИДТЕРДІҢ ЖИНАЛУЫН ЕСЕПТЕУ	
Д. М. Секен, А. С. Сураев, Н. Е. Мухамедов, Р. А. Иркимбеков, О. М. Жанболатов	119
PHOTOELECTROCHEMICAL WATER SPLITTING SIMULATION: TOWARD A COMPREHENSIVE MODELING FRAMEWORK	
N. Bakranov, B. Seitov, D. Bakranova, E. Fattahi, A. Çoruh, A. Niaei	127
НАНОКОМПОЗИТТИ (CrN/ZrN)/(Cr/Zr) НЕГІЗІНДЕГІ ЖАБЫНДАРДЫҢ НАНОӨЛШЕМДІ АРХИТЕКТУРАСЫ	
Р. Е. Сакенова, А. Д. Погребняк, Л. С. Баймолданова.....	142
МИКРОТОЛҚЫНДЫ РАЗРЯДТАҒЫ МЕТАННАН ЖАСАЛҒАН КӨМІРТЕКТІҢ ПЛАЗМОХИМИЯ- ЛЫҚ СИНТЕЗІ	
М. К. Скаков, А. Ж. Миниязов, И. А. Соколов, Т. Р. Туленбергенов, А. А. Агатанова, А. А. Сабыртаева, Б. Е. Бекмагамбетова	150
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ РАДИАЦИОННОГО РАЗОГРЕВА МАТЕРИАЛОВ ПРИ ИХ ОБЛУЧЕНИИ В РЕАКТОРЕ ИГР	
Н. Е. Мухамедов, Г. А. Витюк, Р. А. Иркимбеков, С. А. Должиков, А. С. Сураев, Р. Е. Келсингазина.....	159
ABOUT SOME PRACTICAL ASPECTS OF HANDLING WITH RADIOACTIVE WASTE FROM SMALL MODULAR REACTORS PARTICIPATING IN THE "FIRST" PROGRAM	
V. V. Baklanov, V. A. Pospelov, A. V. Syssaletin, Yu. Yu. Baklanova.....	168
РЕЗУЛЬТАТЫ ФОРСАЙТ-ИССЛЕДОВАНИЯ ПО НАПРАВЛЕНИЮ «ЭНЕРГЕТИКА» В РЕСПУБ- ЛИКЕ КАЗАХСТАН: МЕЖДУНАРОДНЫЙ ОПЫТ И НАЦИОНАЛЬНЫЕ ПЕРСПЕКТИВЫ	
А. С. Серикканов, Л. Д. Байсейит, М. Э. Калменов, А. А. Кибарин, Е. В. Шевченко, А. А. Омирбекова, С. С. Верендеев	178
PREPARATION OF HIGHLY POROUS ACTIVATED CARBON WITH HIGH SPECIFIC SURFACE AREA FROM AGRICULTURAL WASTES	
М. К. Skakov, A. Amirov, E. Shaimardan, S. K. Kabdrakhmanova, A. K. Gaipbergenova, Zh. Sagdollin, A. M. Zhilkashiniva, A. Zh. Miniyaov, V. V. Baklanov, Ye. T. Koyanbayev, N. M. Mukhamedova, G. K. Zhanbolatova.....	190
ПРОВЕРКА СПРАВЕДЛИВОСТИ ПЕРЕКРЕСТНОЙ ПРОВЕРКИ ТЕОРЕТИЧЕСКИХ И ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ НА ПРИМЕРЕ УПРУГОГО РАССЕЯНИЯ ПРОТОНОВ НА ¹⁴C В ДИАПАЗОНЕ 3,7–7,0 МэВ	
Ш. М. Кажыкенов, Д. М. Джансейтов, Д. С. Валиолда, И. В. Алтухов, М. К. Калиев.....	198
СИНТЕЗ НАНОКРИСТАЛЛОВ CuO МЕТОДОМ ЭЛЕКТРООСАЖДЕНИЯ В ТРЕКОВЫХ СТРУКТУРАХ	
А. Д. Акылбекова, Т. Д. Ахмеди, Г. Г. Сарсехан	209
ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИКИ ПАРАМЕТРОВ АКТИВНОЙ ЗОНЫ EPR ПРИ РАБОТЕ НА МОЩНОСТИ	
А. К. Мухамедиев, И. В. Прозорова, А. А. Прозоров, Ю. А. Попов	214
СПИСОК АВТОРОВ.....	224

<https://doi.org/10.52676/1729-7885-2025-4-5-11>

УДК 621.039.3

РАЗРАБОТКА И ВЕРИФИКАЦИЯ НЕЙТРОННО-ФИЗИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ РЕАКТОРА APR-1400

Г. Г. Какимова*, Р. А. Иркимбеков, А. С. Сураев

Филиал «Институт атомной энергии» РГП НЯЦ РК, Курчатов, Казахстан

** E-mail для контактов: kakimova@nnc.kz*

В данной работе представлена разработка и верификация нейтронно-физической модели водо-водяного энергетического реактора APR-1400 с использованием кода MCNP6. Разработана модель активной зоны с детализированным описанием конструктивных элементов. Верификация модели свидетельствует о её достоверности и позволяет использовать её для надёжного прогнозирования нейтронно-физических характеристик реактора в процессе эксплуатации. Результаты могут быть использованы для оптимизации топливных циклов и оценки воздействия новых конструктивных решений.

Ключевые слова: *нейтронно-физический расчет, активная зона, реактивность, APR, нейтронно-физическая модель.*

ВВЕДЕНИЕ

Современные требования к безопасности и эффективности ядерных энергетических установок обуславливают необходимость разработки и верификации нейтронно-физических моделей, предназначенных для достоверного воспроизведения процессов, протекающих в активной зоне реактора. Такие модели служат основой для проведения всестороннего анализа реакторных характеристик при различных режимах эксплуатации, оценки ядерной безопасности, оптимизации проектных решений, а также рационального использования ядерного топлива.

Реактор APR-1400 является улучшенным водо-водяным ядерным энергетическим реактором, разработанный южнокорейской компанией Korea Hydro & Nuclear Power (KHNP) в сотрудничестве Korea Electric Power Corporation (KEPCO). Разработка реактора велась в рамках национальной программы по созданию реакторов следующего поколения на базе технологий, примененных в PWR-реакторе OPR-1000, и завершилась к середине 2000-х годов [1].

APR-1400 был спроектирован с целью повышения уровня безопасности, экономичности и эксплуатационной надежности, включая внедрение пассивных систем безопасности, улучшенные характеристики активной зоны и расширенные возможности управления аварийными ситуациями [2]. Первая коммерческая установка APR-1400 – Shin-Kori 3 – была подключена к сети Южной Кореи в 2016 году. Впоследствии введены в эксплуатацию также блоки Shin-Kori 4, Wakah 1-4 в Объединенных Арабских Эмиратах, демонстрируя международный интерес и признание данной технологии [3].

Ранее в научной литературе неоднократно освещались различные аспекты проектирования и эксплуатации APR-1400. Например, представлены [4] нейтронно-физические расчеты и анализ безопасности реактора с использованием кода MCNP, в [5] исследованы характеристики топлива и обоснование длительности топливного цикла, а в [6] проведена

оценка устойчивости реактора к запроектным авариям. Эти исследования формируют основу, на которой базируется настоящая работа по разработке и верификации нейтронно-физической модели реактора.

APR-1400 [7] представляет собой усовершенствованный водо-водяной энергетический реактор (PWR) поколения III+, разработанный с учетом постфукусимских требований к безопасности, включая повышение устойчивости к внешним воздействиям и внедрение пассивных систем отвода тепла [8–10]. Установка обладает номинальной электрической мощностью порядка 1400 МВт, увеличенной длительностью топливного цикла до 18 месяцев, а также модернизированными системами управления и комбинированной системой безопасности.

Актуальность настоящего исследования определяется необходимостью создания верифицированной нейтронно-физической модели реактора APR-1400, позволяющей с высокой степенью достоверности рассчитывать параметры активной зоны в различных эксплуатационных условиях. Развитие атомной энергетики требует постоянного совершенствования расчетных методик и повышения точности моделирования нейтронно-физических характеристик ядерных реакторов. С учетом высокой мощности, современных требований к безопасности и необходимости оценки эксплуатационных характеристик, разработка верифицированной нейтронно-физической модели имеет важное значение для проведения дальнейших расчетов, направленных на анализ устойчивости и надежности реакторной установки.

Научная новизна работы заключается в разработке и верификации нейтронно-физической модели реактора APR-1400, обеспечивающей достоверное воспроизведение характеристик активной зоны и расширяющей возможности анализа её нейтронно-физических параметров.

Одним из наиболее распространенных и надежных инструментов в области нейтронно-транспортного моделирования является программный комп-

лекс MCNP6 (Monte Carlo N-Particle) [11], обеспечивающий возможность построения геометрических моделей активной зоны и проведения расчетов, учитывающих широкий спектр взаимодействия нейтронов и фотонов с веществом. Применение MCNP к моделированию APR-1400 требует детального описания геометрии, корректного задания физико-технических параметров, а также выполнения серии расчетов, позволяющих получить ключевые нейтронно-физические характеристики, такие как коэффициент размножения нейтронов, температурные коэффициенты, критическая концентрация борной кислоты и др.

Целью исследования является разработка и верификация нейтронно-физической модели реактора APR-1400 с использованием программного комплекса MCNP6. Для достижения данной цели поставлены следующие задачи:

1. Построение расчетной модели активной зоны с учетом разработки и верификации входных данных на основании существующих литературных источников;

2. Проведение нейтронно-физических расчетов для оценки характеристик реактора;

3. Формирование расчетной базы для дальнейшего анализа и контроля параметров функционирования энергетической ядерной установки при различных этапах эксплуатации.

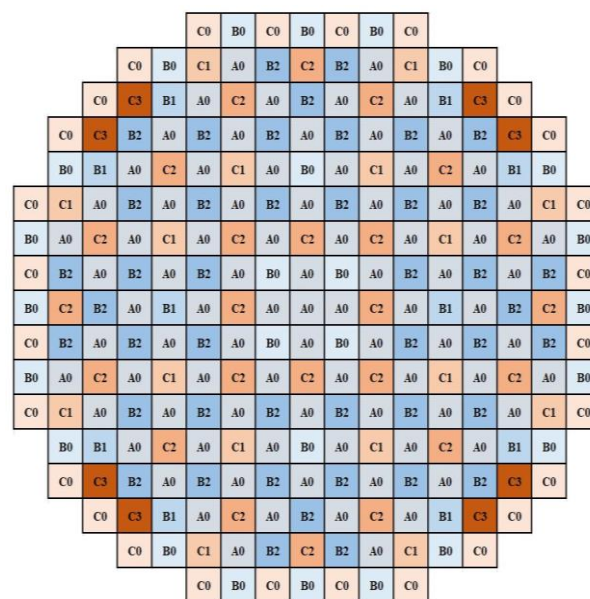
Полученные результаты могут быть использованы для обоснования проектных решений, оптимизации топливной кампании, а также в инженерных исследованиях, направленных на повышение эффективности и надежности эксплуатации ядерных энергетических установок.

ОПИСАНИЕ ОБЪЕКТА ИССЛЕДОВАНИЯ

Объектом исследования является активная зона водо-водяного энергетического реактора APR-1400 третьего поколения, предназначенного для выработки тепловой мощности 3987 МВт. Среднее объемное энерговыделение составляет 100,9 Вт/см³. Активная зона рассчитана на рабочий цикл более 18 месяцев и имеет повышенный тепловой запас более чем на 10% по безопасности и эксплуатационной производительности. Высота активной зоны составляет 381 см, эквивалентный диаметр – 363 см.

На рисунке 1 приведена схема начальной загрузки активной зоны реактора [12]. Как видно из рисунка, активная зона включает восемь различных типов топливных сборок: A0, B0, B1, B2, C0, C1, C2 и C3.

Тепловыделяющая сборка (ТВС) состоит из твэлов, дистанционирующих решеток, направляющих трубок, а также верхней и нижней концевой арматуры. В активной зоне реактора APR-1400 размещена 241 ТВС, каждая из которых содержит твэлы на основе таблеток из диоксида урана, расположенные в квадратной матрице 17×17. Высота ТВС 409,4 см, шаг сборки 20,56 см.



Тип топлива	Описание
A0	1,71 мас. % ²³⁵ U
B0	3,14 мас. % ²³⁵ U
B1	3,14 мас. % / 2,64 мас. % ²³⁵ U, 12 стержней при 8 мас. % Gd ₂ O ₃
B2	3,14 мас. % / 2,64 мас. % ²³⁵ U, 16 стержней при 8 мас. % Gd ₂ O ₃
C0	3,64 мас. % / 3,14 мас. % ²³⁵ U
C1	3,64 мас. % / 3,14 мас. % ²³⁵ U, и 16 стержней при 8 мас. % Gd ₂ O ₃
C2	3,64 мас. % / 3,14 мас. % ²³⁵ U, и 16 стержней при 8 мас. % Gd ₂ O ₃
C3	3,64 мас. % / 3,14 мас. % ²³⁵ U, и 12 стержней при 8 мас. % Gd ₂ O ₃

Рисунок 1. Схема загрузки активной зоны APR-1400 [12]

Состав каждой ТВС предусматривает наличие четырех направляющих трубок и одной центральной направляющей трубки, предназначенной для размещения инструментов измерения нейтронного потока в активной зоне. Для корректировки распределения мощности и компенсации избыточной реактивности на начальном этапе топливного цикла используются выгорающие поглотители на основе оксида гадолиния. Схема топливного стержня/выгорающего поглотителя с основными размерами представлена на рисунке 2 [13].

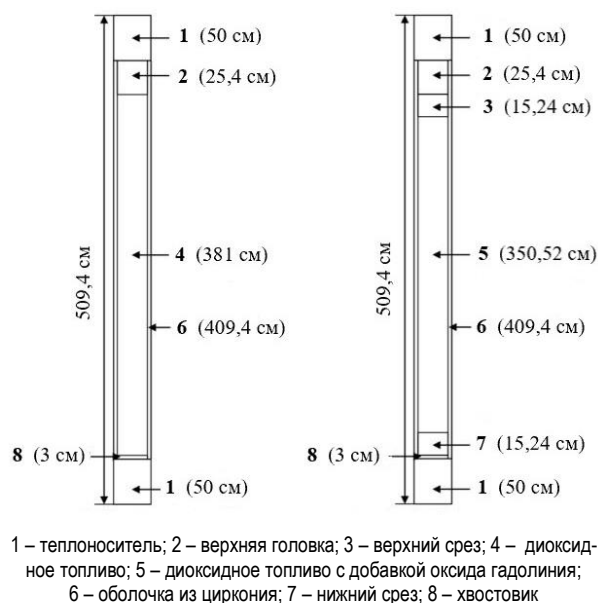


Рисунок 2. Схема топливного стержня сборки A0 (слева) и топливного стержня/выгорающего поглотителя всех остальных сборок [13]

МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ

Исследование включает моделирование геометрической структуры активной зоны реактора и расчёт нейтронно-физических параметров с использованием программного комплекса MCNP6. Для обеспечения корректности расчетов применена библиотека ядерных данных ENDF/B-VII.0, обеспечивающая актуальные сечения взаимодействия нейтронов с различными материалами при широком диапазоне энергий. Для анализа нейтронно-физических характеристик реактора проведен расчет эффективного коэффициента размножения нейтронов (k_{eff}) и доли запаздывающих нейтронов, с последующим сравнением полученных данных с экспериментальными результатами.

Расчет реактивности на основе k_{eff} при первой загрузке топлива в реактор проводится без использования системы управления и защиты, а также без борного регулирования. В этом случае плотность воды принимается равной 1 г/см^3 , а температура теплоносителя и топлива равна 300 К . Реактивность реактора [14, 15] можно вычислить с помощью коэффициента размножения нейтронов k_{eff} по формуле (1):

$$\rho = \left(1 - \frac{1}{k_{eff}} \right) / 0,0064, \quad (1)$$

где ρ – реактивность, k_{eff} – коэффициент размножения нейтронов, $0,0064$ – это эффективная доля запаздывающих нейтронов.

Данный расчет позволяет определить запас реактивности в реакторе при различных условиях эксплуатации.

НЕЙТРОННО-ФИЗИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ РЕАКТОРА

Разработка нейтронно-физической модели реактора APR-1400 в программном коде MCNP6 предусматривает построение детализированной геометрической модели активной зоны с целью проведения расчетов нейтронно-физических параметров. Полученная модель предназначена для проведения расчетов в различных режимах эксплуатации и может быть использована для анализа и оптимизации нейтронно-физических характеристик реактора.

Для проведения нейтронно-физических расчетов, необходимо построить нейтронно-физическую модель реактора APR-1400, с использованием программы MCNP6 (рисунок 3).

Каждая тепловыделяющая сборка (ТВС) включает 236 топливных стержней и 5 направляющих труб, предназначенных для размещения стержней управления. Конструктивные схемы ТВС приведены на рисунке 4.

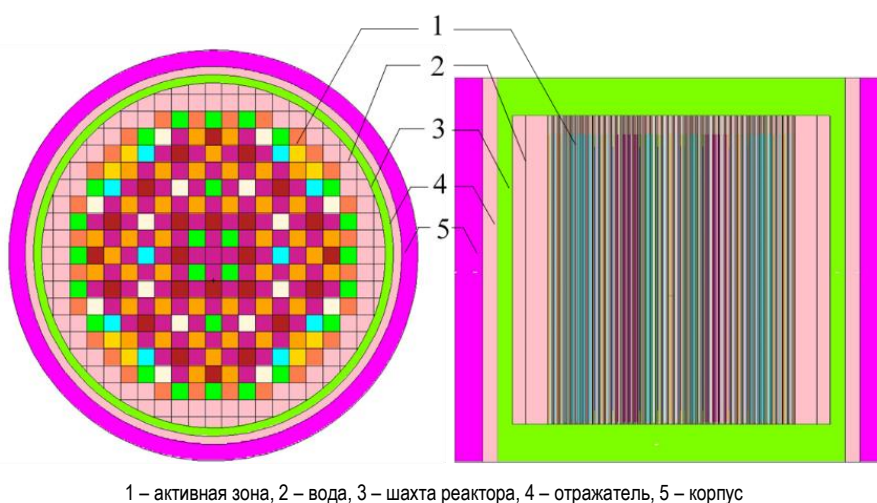
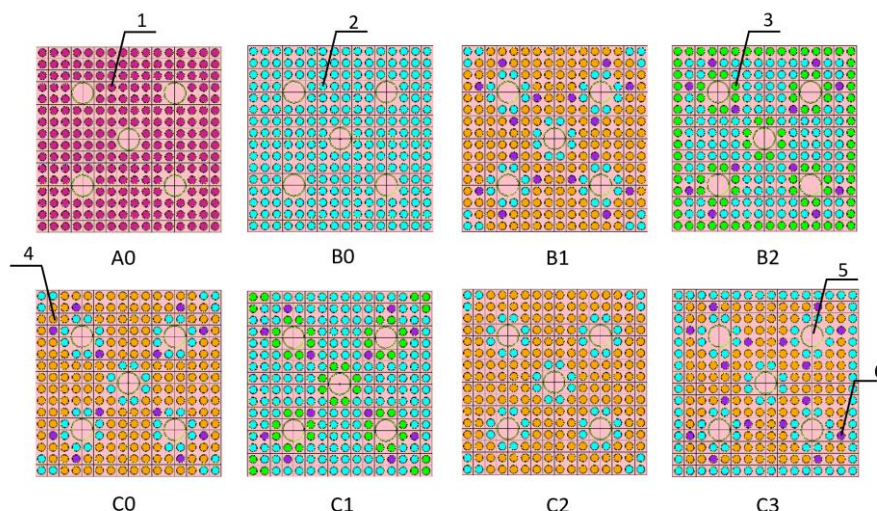


Рисунок 3. Общий вид модели активной зоны



1) твэл с топливом UO_2 (1,71%); 2) твэл с топливом UO_2 (3,14%); 3) твэл с топливом UO_2 (2,64%); 4) твэл с топливом UO_2 (3,64%); 5) направляющий канал; 6) твэл с топливом UO_2 (2%) Gd_2O_3

Рисунок 4. Расположение твэлов в ТВС разных типов

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Для верификации нейтронно-физической модели активной зоны реактора APR-1400 были проведены расчеты с учетом изменения глубины погружения регулирующих стержней системы управления и защиты (СУЗ). Анализ охватывает пять характерных положений стержней – от полностью выведенных (0%) до полностью введенных (100%) в активную зону, при этом концентрация борной кислоты в воде принята равной нулю, чтобы исключить влияние химического регулирования.

При полностью выведенных стержнях СУЗ (0%) реактивность составляет 25,8 β , при этом эффективный коэффициент нейтронов равен 1,21546 ($\pm 0,00010$).

При погружении на 25% реактивность снижается до 25,5 β , $k_{eff} = 1,21204$ ($\pm 0,00016$).

При 50 % – реактивность составляет 25 β , $k_{eff} = 1,20737$ ($\pm 0,00019$).

При 75% – реактивность уменьшается до 24 β , $k_{eff} = 1,19178$ ($\pm 0,00008$).

При полном вводе стержней СУЗ в активную зону (100%) реактивность составляет 18,3 β , $k_{eff} = 1,14304$ ($\pm 0,00006$).

Таким образом, глубина погружения СУЗ не является постоянной и варьируется в процессе эксплуатации в зависимости от условий кампаний и целей регулирования, что было учтено в представленных расчетах. Проведенная оценка позволяет количественно описать влияние степени ввода СУЗ на параметры реактора, что является важной составляющей анализа безопасности.

1) Проведены расчеты для вариантов загрузки всей активной зоны тепловыделяющими сборками одного типа (A0, B0, B1 или C0) и выполнено сравнение коэффициента размножения нейтронов с литературными данными [16]. Результаты этих расчетов

вместе со значениями абсолютной погрешности для каждой конфигурации приведены в таблице 1.

Таблица 1. Результаты расчета k_{eff} в активной зоне с одним типом ТВС

ТВС	$k_{eff 1}$ (расчетные данные)	$k_{eff 2}$ (справочные данные) [16]	Δk
A0	1,18994 $\pm 0,00006$	1,18545	0,00449
B0	1,36940 $\pm 0,00007$	1,35081	0,01859
B1	1,19045 $\pm 0,00006$	1,13775	0,05270
C0	1,39566 $\pm 0,00006$	1,37434	0,02132

2) Выполнены расчеты эффективного коэффициента размножения нейтронов при различных температурах активной зоны и соответствующих концентрациях борной кислоты в воде. Проведено сравнение полученных результатов расчета с литературными данными [17].

Результаты расчетов представлены в таблице 2.

Таблица 2. Зависимость k_{eff} от температуры активной зоны и различной концентрации борной кислоты

Борное регулирование (концентрация бора в воде)	Температура теплоносителя, К	$k_{eff 1}$ (расчетные данные)	$k_{eff 2}$ (справочные данные) [17]	Δk
0 ppm	300	1,21546 $\pm 0,00010$	1,21765	-0,00219
	600	1,15984 $\pm 0,00009$	1,13942	0,02042
	900	1,15116 $\pm 0,00009$	1,13061	0,02055
1000 ppm	300	1,03191 $\pm 0,00007$	1,03406	-0,00215
	600	1,01507 $\pm 0,00006$	1,01760	-0,00253
	900	1,00788 $\pm 0,00007$	1,00973	-0,00185
2000 ppm	300	0,92092 $\pm 0,00006$	0,90907	0,01185
	600	0,90841 $\pm 0,00005$	0,92594	-0,01753
	900	0,90257 $\pm 0,00006$	0,91899	-0,01707

3) На рисунке 5 представлен график, отражающий зависимость эффективного коэффициента размножения нейтронов от концентрации борной кислоты в случаях, когда органы регулирования СУЗ полностью введены в активную зону и выведены из нее.

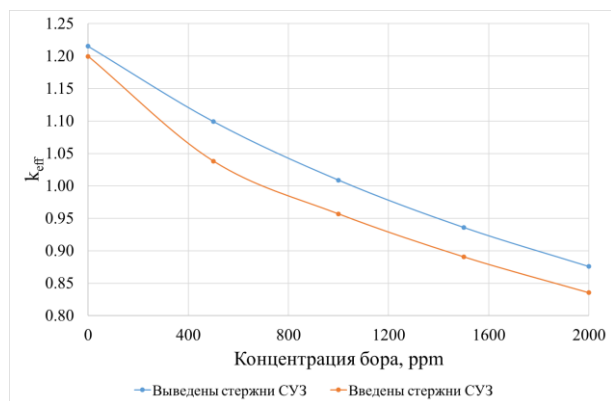


Рисунок 5. Зависимость коэффициента размножения нейтронов от концентрации бора

Поскольку бор является эффективным поглотителем тепловых нейтронов, то увеличение его концентрации в обоих случаях снижает значение эффективного коэффициента размножения нейтронов, а значит, и реактивность реактора. При этом можно увидеть, что критичность реактора ($k_{eff} \sim 1$) без стержней управления достигается при концентрации бора 1100 ppm в теплоносителе, а со стержнями управления, введенными в активную зону, приблизительно при 700 ppm.

Таким образом, выполнена разносторонняя верификация нейтронно-физической модели реактора APR-1400, учитывающая характеристики органов регулирования, параметры ТВС и теплоносителя.

4) Для определения коэффициента Доплера предварительно рассчитано изменение реактивности [18] с использованием уравнения (2):

$$\Delta\rho = \frac{k_{eff}^{T_2} - k_{eff}^{T_1}}{k_{eff}^{T_2} \cdot k_{eff}^{T_1}}, \quad (2)$$

где $k_{eff}^{T_2}$ и $k_{eff}^{T_1}$ – это эффективный коэффициент размножения нейтронов для температур T_2 и T_1 . Коэффициент Доплера (Dc) рассчитывается как соотношение изменения реактивности к изменению температуры топлива с использованием уравнения (3) и выражается в pcm/K [19]:

$$D_c = \frac{\Delta\rho}{\Delta T}, \quad (3)$$

где ΔT – изменение температуры топлива ($\Delta T = 600$ К в данном случае).

На рисунке 6 представлена зависимость реактивности от температуры топлива для двух конфигураций активной дозы: при полностью выведенных регулирующих стержнях СУЗ и при полностью введенных стержнях СУЗ.

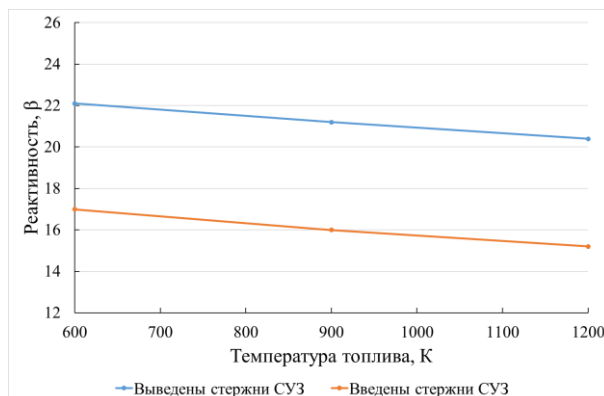


Рисунок 6. Изменение реактивности к зависимости от температуры топлива

Установлено, что при повышении температуры топлива с 600 К до 1200 К снижение реактивности (эффект Доплера) составляет $-2,13$ рсм/К для конфигурации с введёнными стержнями СУЗ и $-2,01$ рсм/К для конфигурации без стержней СУЗ.

5) Распределение энерговыделения по радиусу активной зоны (АЗ)

Проведены расчеты для определения энерговыделения по радиусу активной зоны. Значения энерговыделения представлены на рисунке 7.

По результатам расчетов установлено, что максимальное энерговыделение (4,05 Вт/г) наблюдается у ТВС В0, расположенной в правом углу относительно центральной ТВС, тогда как минимальное (0,34 Вт/г) отмечается в ТВС С0, расположенной в периферии активной зоны.

[illegible]

Рисунок 7. Распределение энергоснабжения по радиусу АЗ (Вт/г)

Для сравнения значений приведем k_r – коэффициент неравномерности энерговыделения по формуле (4):

$$k_r = \frac{q_{max}}{q_r}, \quad (4)$$

где q_{max} – максимальное энерговыделение у ТВС, расположенной относительно центра реактора; q_r – среднее энерговыделение по радиусу активной зоны. Коэффициент неравномерности энерговыделения $k_r = 9$ свидетельствует о значительной неравномерности распределения энерговыделения в активной зоне реактора, при которой максимальное значение энерговыделения существенно превосходит среднее [20].

6) *Распределение энерговыделения по высоте активной зоны (АЗ)*

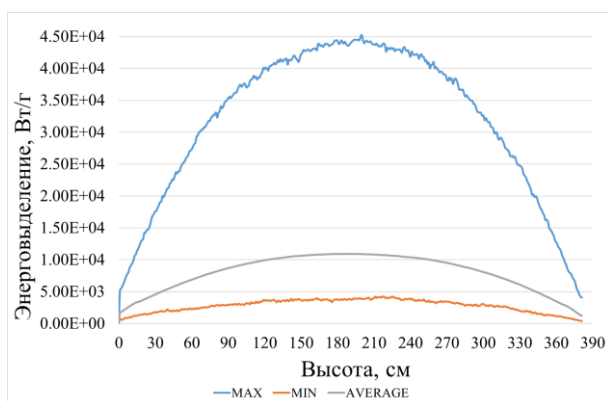


Рисунок 8. Распределение энерговыделения по высоте АЗ

На рисунке 8 представлено распределение удельного энерговыделения (Вт/г) по высоте активной зоны. Данные на графике отражают максимальные, минимальные и средние значения по горизонтальным сечениям. Характерная форма кривой с максимумом в центральной части и спадом к концам зоны соответствует типичному распределению нейтронного потока в тепловом реакторе. Максимальное значение достигается примерно на высоте 200 см. Среднее распределение имеет сглаженный вид и отражает общую закономерность протекания реакций деления вдоль высоты активной зоны.

Следует отметить, что рассчитанный в настоящей работе коэффициент неравномерности (КНЭ = 9,0) определяется как отношение локального максимального энерговыделения к среднему значению по высоте, полученное на основе полной геометрии активной зоны без применения сглаживания профиля мощности и регулирования выгорания. В литературных источниках [14], приводятся усреднённые или нормированные значения (КНЭ $\approx 1,6$), что приводит к заметному расхождению с результатами данного исследования.

ВЫВОДЫ

В данной работе была построена и верифицирована нейтронно-физическая модель активной зоны реактора APR-1400 с использованием кода MCNP6. Результаты моделирования показали хорошее согласие с литературными данными, что подтверждает корректность реализации геометрической структуры и

параметров материалов, используемых при построении модели. Проведённый анализ позволяет утверждать, что разработанная модель может быть использована для дальнейших исследований по оптимизации топливного цикла, включая изучение альтернативных вариантов загрузки топлива, применение уран-гадолиниевых и борсодержащих ТВЭЛов, а также оценку влияния новых конструкционных материалов оболочек ТВЭЛов. В дальнейшем планируется расширение модели с учётом температурных эффектов за счёт использования температурозависимых сечений и моделирования различных режимов эксплуатации с целью повышения эффективности и безопасности реакторной установки APR-1400.

Работа выполнена при финансовой поддержке Агентства Республики Казахстан по атомной энергии по научно-технической программе BR24792713 «Развитие атомной энергетики в Республике Казахстан».

ЛИТЕРАТУРА / REFERENCES

1. KEPCO E&C. APR1400 Design Overview. – Yongin: Korea Electric Power Corporation Engineering & Construction Company, 2002. – 40 p.
2. KAERI. Development of Advanced Power Reactor (APR1400) / Korea Atomic Energy Research Institute // Nuclear Engineering and Technology. – 2004. – Vol. 36, No. 1. – P. 1–14. – ISSN 1738-5733.
3. World Nuclear Association. Nuclear Power in South Korea – 2024. <https://world-nuclear.org/information-library/country-profiles/countries-o-s/south-korea.aspx>
4. Alrwashdeh M., Alameri S. A. Preliminary neutronic analysis of alternative cladding materials for APR-1400 fuel assembly // Nuclear Engineering and Design. – 2021. – Vol. 384. – P. 111486.
5. Alrwashdeh M., Alameri S. A. A Neutronics Study of the Initial Fuel Cycle Extension in APR-1400 Reactors // Arabian Journal for Science and Engineering. – 2023.
6. Kang D. G. et al. Assessment of APR-1400 Emergency Core Cooling System performance for design basis LOCA redefinition // Nuclear Engineering and Design. – 2013.
7. Advanced Power Reactor 1400 MWe (APR1400) [Status report 83]. – KEPCO E&C/KHNP, 2011. – 37 p.
8. IAEA. Action Plan on Nuclear Safety – Vienna: International Atomic Energy Agency, 2011. – 19 p. <https://www.iaea.org/sites/default/files/actionplanns.pdf>
9. OECD/NEA. The Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant Accident: OECD/NEA Nuclear Safety Response and Lessons Learnt. – NEA No. 7161. – Paris: Nuclear Energy Agency, 2013. – 136 p. – ISBN 978-92-64-99155-7.
10. U.S. NRC. Enhancing Reactor Safety in the 21st Century: The Near-Term Task Force Review of Insights from the Fukushima Dai-ichi Accident. – Washington, D.C.: U.S. Nuclear Regulatory Commission, July 2011. – 96 p. <https://www.nrc.gov/docs/ML1118/ML111861807.pdf>
11. Goorley, T., James, M., Booth, T., Brown, F., Bull, J., Cox, L.J., Durkee, J., Elson, J., Fensin, M., Forster, R.A. and Hendricks, J. (2012). Initial MCNP6 release overview. Nuclear Technology, 180(3), pp.298-315. <https://doi.org/10.13182/NT11-135>.

12. Alrwashdeh, M.; Alameri, S.A. Chromium-Coated Zirconium Cladding Neutronics Impact for APR-1400 Reactor Core. *Energies*. – 2022. – Vol. 15(21). – P. 8008. <https://doi.org/10.3390/en15218008>
13. Yuk, S. APR1400 Reactor Core Benchmark Problem Book; Technical Report RPL-INERICA-004; Korea Atomic Energy Research Institute: Daejeon, Korea, 2019.
14. Reactivity – Definition & Calculation // Nuclear-power.com. https://www.nuclear-power.com/nuclear-power/reactor-physics/nuclear-fission-chain-reaction/reactivity/?utm_source
15. Introduction to Water Cooled Reactor Theory with the Micro-Physics. – Vienna: IAEA, 2014. – (Training Course Series No. 70). https://www-pub.iaea.org/MTCD/Publications/PDF/TCS-70web.pdf?utm_source
16. K.E. Barr, S. Choi, J. Kang, B. Kochunas. Verification of MPACT for the APR1400 Benchmark // *Energies*. – 2021. – Vol. 14. – P. 3831. <https://doi.org/10.3390/en14133831>
17. Z. Alnoamani, S. A. Alameri, M. Elsayi. Neutronic and Fuel Performance Evaluation of Accident Fuel Concepts in APR1400 Reactor. – Conference: Proceedings of the American Nuclear Society Annual Meeting, June 17–21, 2018, Philadelphia, PA, USA. https://www.researchgate.net/profile/ZainabAlnoamani2/publication/329357617_Neutronic_and_Fuel_Performance_Evaluation_of_Accident_Tolerant_Fuel_Concepts_in_APR1400_Reactor/links/64acc65bb9ed6874a50b9b8c/Neutronic-and-Fuel-Performance-Evaluation-of-Accident-Tolerant-Fuel-Concepts-in-APR1400-Reactor.pdf
18. Joint International Topical Meeting on Mathematics & Computation and Supercomputing in Nuclear Applications (M&C + SNA 2007) Monterey, California, April 15-19, 2007, on CD-ROM, American Nuclear Society, LaGrange Park, IL (2007) “Doppler coefficient of reactivity – benchmark calculations for different enrichments of UO₂” L. Thilagam, C. Sunil Sunny and K.V. Subbaiah; K. Devan; Lee, Young-Seok; V. Jagannathan.
19. Risk Engineering LTD., Belene ISAR – Training course provided for Vietnam Atomic Energy Institute VINATOM, Sofia, Bungari, 15 Jan – 9 March 2012.
20. В.А. Горбунов, С.С. Теплякова, Н.Е. Лоншаков, С.Г. Андриянов, П.А. Минеев. Исследование влияния конструктивного параметра тепловыделяющего элемента на коэффициент неравномерности теплового выделения по высоте реактора ВВЭР-100. – 2023. [V.A. Gorbunov, S.S. Teplyakova, N.E. Lonshakov, S.G. Andriyanov, P.A. Mineev. Issledovanie vliyaniya konstruktivnogo parametra teplovydelyayushchego elementa na koeffitsient neravnomernosti teplovogo vydeleniya po vysote reaktora VVER-100. – 2023. (In Russ.)] <https://static.nuclear-power-engineering.ru/articles/2023/02/03.pdf>

ӘЗІРЛЕУ ЖӘНЕ ВЕРИФИКАЦИЯЛАУ НЕЙТРОНДЫҚ-ФИЗИКАЛЫҚ МОДЕЛІН РЕАКТОРДЫҢ APR-1400

Г. Г. Какимова*, Р. А. Иркимбеков, А. С. Сураев

ҚР ҰАО РМК «Атом энергиясы институты» филиалы, Курчатов, Қазақстан

* Байланыс үшін E-mail: kakimova@nnc.kz

Бұл жұмыста MCNP6 кодының көмегімен сумен реттелетін қуатты реактордың APR-1400 нейтронды-физикалық моделін жасау және тексеру жүргізілді. Құрылымдық элементтердің толық сипаттамасы бар белсенді аймақ әзірленді. Модельді тексеру реактордың жұмысын одан әрі қолдауды стратегиялық жоспарлау үшін сенімді негіз болады. Нәтижелер отын циклдарын оңтайландыру және жаңа дизайн шешімдерінің әсерін бағалау үшін пайдаланылуы мүмкін.

Түйін сөздер: нейтронды-физикалық есептеу, белсенді аймақ, реактивтілік, APR, нейтронды-физикалық модель.

DEVELOPMENT AND VERIFICATION OF THE NEUTRON-PHYSICS MODEL OF THE APR-1400 REACTOR

G. G. Kakimova*, R. A. Irkimbekov, A. S. Surayev

Branch “Institute of Atomic Energy” RSE NNC RK, Kurchatov. Kazakhstan

* E-mail for contacts: kakimova@nnc.kz

In this work, a neutron-physical model of the APR-1400 water-moderated power reactor was developed and verified using the MCNP6 code. An active zone with a detailed description of the design elements was developed. The verification of the model will provide a reliable basis for strategic planning of further support for the operation of the reactor. The results can be used to optimize fuel cycles and assess the impact of new design solutions.

Keywords: neutron-physical calculation, active zone, reactivity, APR, neutron physics model.

<https://doi.org/10.52676/1729-7885-2025-4-12-19>

УДК 539.17.01: 539.17.02

АНАЛИЗ РАССЕЯНИЯ α -ЧАСТИЦ И ${}^3\text{He}$ НА ЯДРАХ ${}^9\text{Be}$ В ШИРОКОЙ ОБЛАСТИ ЭНЕРГИЙ В РАМКАХ ОПТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ И МЕТОДА СВЯЗАННЫХ КАНАЛОВ

**К. А. Талпакова^{1,2*}, Н. Буртебаев¹, Л. И. Галанина³, Маулен Насурлла^{1,4}, С. Б. Сакута⁵, С. К. Сахиев¹,
Маржан Насурлла¹, Р. А. Ходжаев¹, Д. А. Исаев^{1,4}, А. Қ. Нұрпейсов^{1,4}, С. А. Турганова^{1,4}**

¹ РГП «Институт ядерной физики» Агентства РК по атомной энергии, Алматы, Казахстан

² Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

³ Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
Институт ядерной физики им. Скобелева, Москва, Россия

⁴ Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан

⁵ НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

* E-mail для контактов: tkk_777@mail.ru

Проведен анализ по оптической модели ядра существующих экспериментальных данных упругого рассеяния α -частиц и ${}^3\text{He}$ на ядрах ${}^9\text{Be}$ в широкой области энергий (18–100 МэВ). Найдены оптимальные параметры оптических потенциалов. С этими потенциалами методом связанных каналов проанализированы измеренные угловые распределения упругого и неупругого рассеяния при энергиях α -частиц 45 и 50 МэВ и ${}^3\text{He}$ с энергиями 50 и 60 МэВ с возбуждением коллективных состояний 2,429 МэВ ($5/2^-$) и 6,38 МэВ ($7/2^-$) ядра ${}^9\text{Be}$. Извлечены значения параметров квадрупольной деформации. Сделана оценка вклада в возбуждение ядра кластерной структуры и механизма обмена кластерами ${}^5\text{He}$ и ${}^6\text{He}$.

Ключевые слова: ядро ${}^9\text{Be}$, α -частицы, ${}^3\text{He}$, оптическая модель, метод связанных каналов, квадрупольная деформация.

ВВЕДЕНИЕ

В легких ядрах, в отличие от более тяжелых, эффекты альфа-кластеризации выражены более ярко [1, 2]. Это находит отражение в аномальном рассеянии на большие углы именно на легких ядрах. Альфа-частица представляет собой очень прочное образование с энергией связи нуклона, значительно превышающей аналогичные значения соседних легких ядер. Первое возбужденное состояние альфа-частицы лежит при энергии около 20 МэВ. Особый интерес представляют ядра с основными состояниями вблизи порога развала, где кластеризация доминирует [1]. В первую очередь это касается изотопа ${}^9\text{Be}$. Указанное ядро обладает, так называемой «боромиевской» структурой (Borromean structure), характеризующейся как трех-частичной ($\alpha + \alpha + n$), так и двух-частичной (${}^8\text{Be} + n$ и $\alpha + {}^5\text{He}$) системами, состоящими как из стабильных (α , n), так и нестабильных (${}^8\text{Be}$, ${}^5\text{He}$) кластеров. Хотя ${}^8\text{Be}$, ${}^5\text{He}$ нестабильны, они участвуют в формировании стабильной системы ${}^9\text{Be}$, которая распадается при удалении любого входящего в ее состав кластера (α , n , ${}^8\text{Be}$, ${}^5\text{He}$) [3–6].

Современное состояние кластеризации легких ядер в рамках микроскопической теории дано в работе [2]. В последние годы достигнут большой прогресс в понимании явления кластеризации в ${}^9\text{Be}$ и многих других ядрах. Кластерная структура ядра ${}^9\text{Be}$ изучалась в ряде работ в рамках различных подходов [7–10].

В экспериментах трех-частичная структура ${}^9\text{Be}$ ($\alpha + \alpha + n$) проявляет себя в реакциях развала и в бинарных реакциях с адронами при энергиях налетающих

частиц порядка 100 МэВ/нуклон. В этом случае для анализа часто используется модель Глаубера [11].

Двух-частичная кластерная структура ${}^9\text{Be}$ (${}^8\text{Be} + n$ и $\alpha + {}^5\text{He}$) исследуется в различных реакциях при энергиях около 10 МэВ/нуклон. В таких реакциях ядро вносится относительно малый импульс, и в этом случае результат существенно зависит от структуры участвующих в реакции ядер.

Существует другой аспект, касающийся свойств ядра бериллия, помимо его кластерной структуры. Согласно оболочечной модели ${}^9\text{Be}$, находящийся в середине p -оболочки, обладает очень большой деформацией [12], характеризуемой ядерным квадрупольным моментом $Q = +52,88$ мбн [13]. Вследствие чего низлежащие состояния ${}^9\text{Be}$ имеют выраженную коллективную природу и распределены по двум ротационным полосам, начинающимся с основного ($3/2^-$) и первого возбужденного ($E_x = 1,684$ МэВ, $1/2^+$) состояний. Первая полоса включает уровни 2,429 МэВ ($5/2^-$) и 6,38 МэВ ($7/2^-$), а вторая – 3,05 МэВ ($5/2^+$), 4,70 МэВ ($3/2^+$) и 6,76 МэВ ($9/2^+$). Соответствующие переходы изучались в неупругом рассеянии. Однако анализ экспериментальных угловых распределений главным образом проводился в рамках метода искаженных волн. Но при большой деформации ${}^9\text{Be}$ и, как следствие, при сильных квадрупольных переходах в неупругом рассеянии частиц на этом ядре, необходим учет связи каналов упругого и неупругого рассеяния. Поэтому в этом случае анализ методом связанных каналов является наиболее адекватным.

Целью настоящей работы является детальный анализ существующих экспериментальных данных

АНАЛИЗ РАССЕЯНИЯ α -ЧАСТИЦ И ^3He НА ЯДРАХ ^9Be В ШИРОКОЙ ОБЛАСТИ ЭНЕРГИЙ В РАМКАХ ОПТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ И МЕТОДА СВЯЗАННЫХ КАНАЛОВ

по упругому и неупругому рассеянию α -частиц и ^3He на ядрах ^9Be в рамках оптической модели и метода связанных каналов (МСК). При этом использовались оптические потенциалы, найденные из анализа упругого рассеяния α -частиц и ^3He в широкой области энергий. Экспериментальные сечения рассеяния α -частиц были взяты из работ, выполненных при энергиях налетающих частиц 18,4 МэВ [14], 29 и 45 МэВ [15], 50,5 МэВ [16] и 104 МэВ [17]. Сечения рассеяния ^3He взяты из работ, выполненных при энергиях 30 и 40 МэВ [18] и 50 и 60 МэВ [19]. Отметим, что МСК был ранее использован для анализа данных по рассеянию ионов ^3He на ядрах ^9Be при энергиях 30, 40 и 47 МэВ [18].

АНАЛИЗ ДАННЫХ ПО УПРУГОМУ РАССЕЯНИЮ, ОПТИЧЕСКИЕ ПОТЕНЦИАЛЫ

Выбор оптимальных параметров оптических потенциалов из данных по упругому рассеянию в широкой области энергий налетающих частиц очень важен для анализа неупругого рассеяния и реакций на ^9Be .

На первом этапе упругое рассеяние анализировалось по оптической модели (ОМ) ядра. В расчетах использовался феноменологический потенциал Вудса-Саксона с объемным поглощением в форме:

$$U(r) = -V_0 f(r, R_V, a_V) - iW_V f(r, R_W, a_W) + V_C(r), \quad (1)$$

где V_0 и W_V – глубины реальной и мнимой частей ядерного потенциала, $f(r, R_i, a_i) = (1 + e^{r/R_i})^{-1}$ – Вудс-Саксоновские формфакторы с $x = (r - R_i A^{1/3})/a_i$ и геометрическими параметрами радиуса $R_i = r_i A^{1/3}$ и диффузности a_i ($i = V, W$). $V_C(r)$ – кулоновский потенциал равномерно заряженной сферы с радиусом $R_C = r_C A^{1/3}$ при $r_C = 1,28$ Фм.

Дифференциальные поперечные сечения (ДПС) вычислялись по программе FRESKO [20]. Для исследования зависимости реальной части потенциала от энергии налетающей частицы и для исключения дискретной неоднозначности в определении глубины реальной части (V_0) потенциала использовались экспериментальные данные по упругому рассеянию α -частиц, измеренные в интервале энергии 18–104 МэВ [14–17]. В экспериментальных угловых распределениях упругого рассеяния при низких энергиях (18–50 МэВ), измеренных в полном угловом диапазоне, наблюдался значительный подъем сечений под большими углами, связанный, скорее всего, с механизмом обмена кластером. С целью исключения его вклада в сечение упругого потенциального рассеяния подгонка теоретических сечений по ОМ к экспериментальным данным осуществлялась только для передней полусферы, где механизм потенциального рассеяния доминирует. В начальном этапе подбор оптимальных параметров потенциалов взаимодействия по ОМ осуществлялся вариацией глубин реальной и мнимой частей потенциала (1) с использованием фиксированных значений радиусов: $r_V = 1,245$ Фм и $r_W = 1,57$ Фм, использованных в работе [21]. На вто-

ром этапе были зафиксированы значения диффузности: $a_V = 0,791$ Фм и $a_W = 0,91$ Фм, найденные из подгонки данных при энергии 104 МэВ. В результате для каждой энергии были получены три набора ОП – A, B и C, средний, мелкий и глубокий потенциалы, соответственно (таблица 1). Расчетные дифференциальные поперечные сечения при энергиях 18–104 МэВ сопоставляются с экспериментальными данными на рисунке 1.

Таблица 1. Параметры оптических потенциалов и объемных интегралов (J_V , J_W) для системы « $\alpha + ^9\text{Be}$ »

E_α , МэВ	На- бор	V_0 , МэВ	a_V , Фм	W_V , МэВ	a_W , Фм	J_V , МэВФм ³	J_W , МэВФм ³
18,4	A	104,5	0,791	6,55	0,910	406,99	46,98
	B	50,0	0,791	6,55	0,910	194,73	46,98
	C	130,0	0,791	6,55	0,910	506,30	46,98
29	A	90,7	0,791	15,19	0,910	353,24	108,95
	B	70,0	0,791	15,19	0,910	272,62	108,95
	C	160,0	0,791	15,19	0,910	623,14	108,95
45	A	96,0	0,791	18,00	0,910	373,89	129,11
	B	70,0	0,791	18,00	0,910	272,62	129,11
	C	160,0	0,791	18,00	0,910	623,14	129,11
50,5	A	96,02	0,791	18,35	0,910	373,96	131,62
	B	70,0	0,791	18,35	0,910	272,62	131,62
	C	160,0	0,791	18,35	0,910	623,14	131,62
104	A	102,8	0,791	21,40	0,910	400,37	153,49
	B	70,0	0,791	21,40	0,910	272,62	153,49
	C	240	0,791	21,40	0,910	934,71	153,49

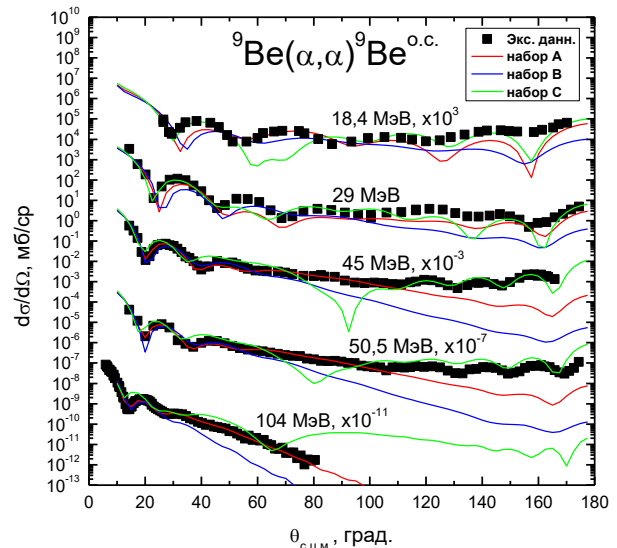


Рисунок 1. Угловые распределения дифференциальных сечений α -частиц, рассеянных на ядрах ^9Be при энергиях 18,4, 29, 45, 50,5 и 104 МэВ (красные кривые рассчитаны с набором A, синие – B, зеленые – C). Экспериментальные сечения взяты из работ [14–17]

Значения объемных интегралов реальной части потенциала J_V из таблицы 1 свидетельствуют о наличии трех дискретных семейств (A, B, C) при значениях J_V в районе 200, 400 и 600 МэВФм³. Использование

набора ОП (B) с малой глубиной для описания ДПС приводит к сильному уменьшению сечений с увеличением угла рассеяния. В случае же применения для расчетов глубокого потенциала (набор C) наблюдается обратная картина, особенно для энергии 104 МэВ свыше 70 градусов происходит резкое возрастание расчетных сечений. Наилучшие согласия теоретических расчетных ДПС с экспериментальными данными для передней полусферы достигнуто с использованием ОП со средней глубиной (A). Отметим, что расчеты по ОП фактически не могут воспроизвести подъем сечения под большими углами.

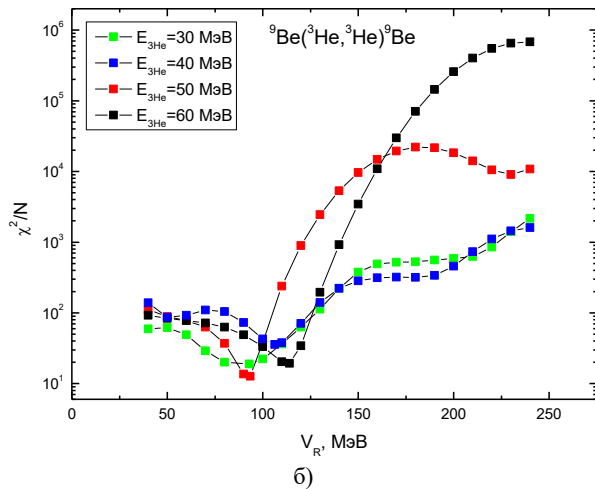
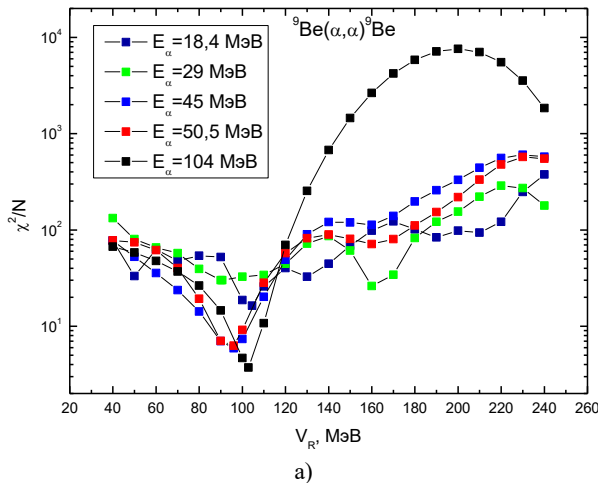


Рисунок 2. Зависимость χ^2 от глубины действительной части потенциала (V_0) для α -частиц (а) и ${}^3\text{He}$ (б)

Для изучения динамики дискретной неоднозначности от энергии при определении глубины действительной части потенциала были фиксированы радиусы и диффузности действительной и мнимой частей оптимальных потенциалов, а также глубина мнимого потенциала A для всех энергий. С этими параметрами, для набора A , были вычислены значения χ^2 для действительной части оптического потенциала в диапазоне глубин от 40 МэВ до 240 МэВ с шагом 10 МэВ при пяти значениях энергии. Установленная

таким образом зависимость χ^2 от глубины действительной части потенциала для каждой энергии падающих частиц показана на рисунке 2а. Видно, что при низких энергиях в значениях χ^2 наблюдается несколько минимумов. С увеличением энергии налетающих частиц число минимумов уменьшается, что позволило устранить дискретную неоднозначность и уменьшить число наборов оптических потенциалов до одного оптимального.

Аналогичное исследование было выполнено и для упругого рассеяния ионов ${}^3\text{He}$ на ядре ${}^9\text{Be}$. Для анализа были привлечены данные при энергиях 30 и 40 МэВ [18], 50 и 60 МэВ [19]. В качестве стартовых ОП мы использовали значения, полученные в работе [19]. Как и в случае рассеяния α -частиц в значениях χ^2 для системы ${}^3\text{He}+{}^9\text{Be}$ наблюдаются несколько слабо выраженных минимумов при низких энергиях, а при энергии 60 МэВ имеется лишь один выраженный минимум χ^2 (см. рисунок 2б), что также позволило устранить дискретную неоднозначность и уменьшить число оптических потенциалов до одного оптимального.

Отметим, что в найденных по оптической модели параметрах потенциала неявно заложена компенсация неучтенной структуры ядра-мишени, особенно в мнимой части потенциала. Поэтому с переходом от ОП к более адекватным методам описания экспериментальных данных найденные параметры ОП могут меняться.

АНАЛИЗ ДАННЫХ ПО УПРУГОМУ И НЕУПРУГОМУ РАССЕЯНИЮ α -ЧАСТИЦ И ${}^3\text{He}$ НА ЯДРАХ ${}^9\text{Be}$ МЕТОДОМ СВЯЗАННЫХ КАНАЛОВ

Поскольку ядро ${}^9\text{Be}$, как уже отмечалось выше, обладает ярко выраженной квадрупольной деформацией, а его нижние состояния являются членами ротационных полос с $K = 3/2$ и $K = 1/2$, наиболее адекватным методом анализа рассеяния является метод связанных каналов. В этом случае, принимая во внимание только квадрупольную деформацию, стандартное выражение для ядерного радиуса оптического потенциала в формуле (1) имеет вид: $r_i(\theta) = r_i[1 + \beta_2 Y_{20}(\theta, \varphi)]$, что приводит к соответствующей деформации оптического потенциала.

В наших расчетах мы пренебрегали смешиванием полос основного состояния ($K = 3/2$) и полосы, начинающейся с уровня 1,684 МэВ ($1/2^+$). Это оправдано, поскольку сечения переходов на уровни полосы $K = 1/2$ малы.

Для анализа использовались ранее полученные экспериментальные данные по рассеянию α -частиц при энергии 50,5 МэВ и ${}^3\text{He}$ при энергиях 60 МэВ [22]. При энергии 45 МэВ данные для неупругого рассеяния были извлечены из дополнительных обработок энергетических спектров рассеянных α -частиц, измеренных в работе [15]. При энергии $E_{3\text{He}} = 50$ МэВ данные для неупругого рассеяния также были извлечены из дополнительных обработок

АНАЛИЗ РАССЕЯНИЯ α -ЧАСТИЦ И ^3He НА ЯДРАХ ^9Be В ШИРОКОЙ ОБЛАСТИ ЭНЕРГИЙ В РАМКАХ ОПТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ И МЕТОДА СВЯЗАННЫХ КАНАЛОВ

энергетических спектров рассеянных ионов ^3He , измеренных ранее в работе [19].

Использованные в расчетах методом связанных каналов оптические потенциалы приведены в таблице 2. Они отличаются от потенциалов таблицы 1 только уменьшенной глубиной мнимых потенциалов (W_V). Это делалось для улучшения согласия расчетных сечений с экспериментом при включении связи каналов.

Таблица 2. Параметры ОП, использованных в расчетах упругого и неупругого рассеяния методом связанных каналов

Частица	E , МэВ	V_0 , МэВ	r_V , Фм	a_V , Фм	W_V , МэВ	r_W , Фм	a_W , Фм
α	45	96,0	1,245	0,791	12,35	1,57	0,91
	50,5	96,02	1,245	0,791	15,35	1,57	0,91
^3He	50,0	93,4	1,15	0,72	11,9	1,50	0,80
	60,0	114,0	1,15	0,87	13,7	1,59	0,80

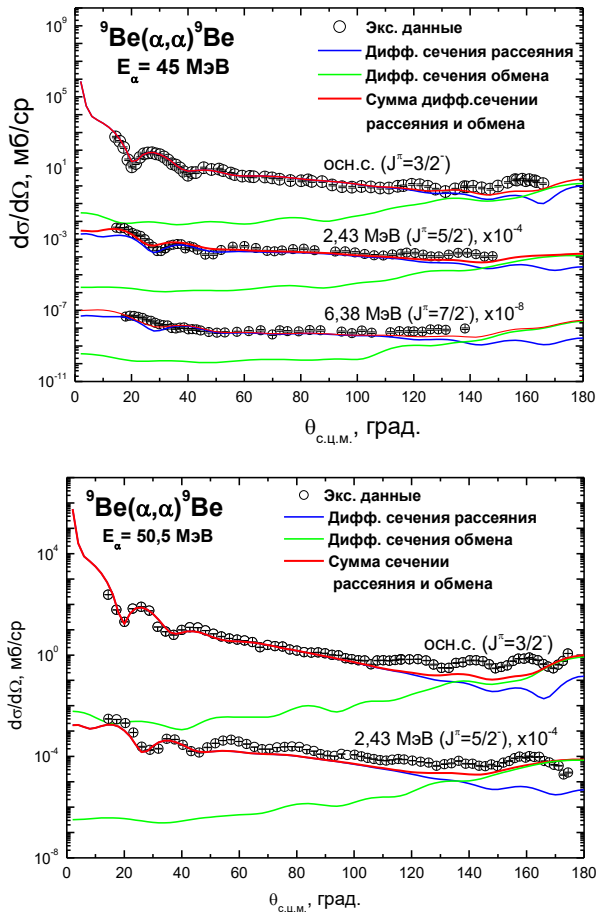


Рисунок 3. Дифференциальные сечения упругого и неупругого рассеяния α -частиц на ядре ^9Be

Из нормировки расчетных сечений на экспериментальные данные неупругого рассеяния в области углов передней полусферы были получены усредненные значения длин деформации δ_2 ($5/2^-$) = 1,11 Фм и δ_2 ($7/2^-$) = 0,52 Фм. Эти значения соответствуют па-

раметрам деформации $\beta_2 = 0,44 \pm 0,1$ и $\beta_2 = 0,21 \pm 0,1$ для состояний 2,43 МэВ ($5/2^-$) и 6,38 МэВ ($7/2^-$) при соответствующих радиусах реального потенциала. Ошибки связаны как с неоднозначным выбором параметров потенциала, так и области нормировки теоретических сечений. Сопоставление расчетных и экспериментальных сечений рассеяния α -частиц и ^3He показано на рисунках 3 и 4 синими кривыми.

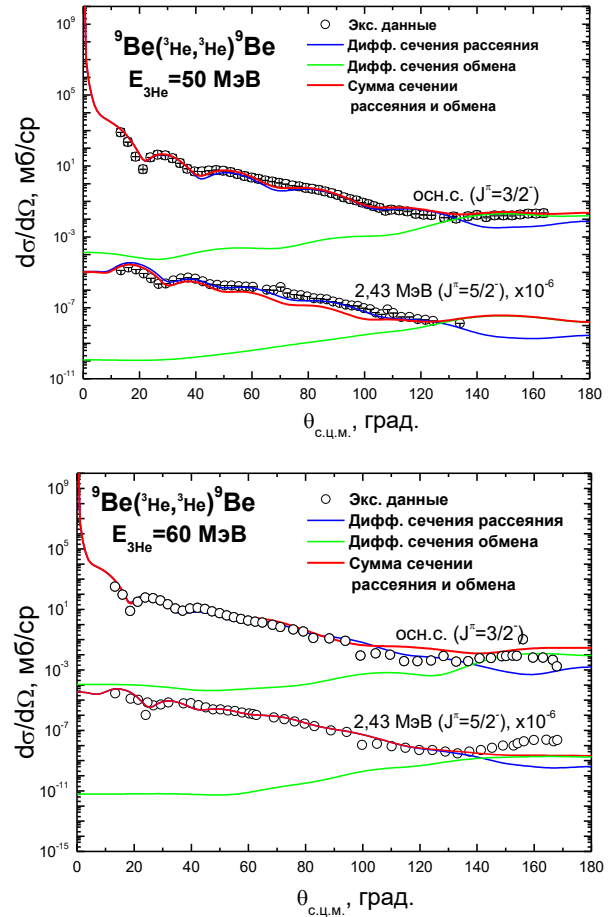


Рисунок 4. Дифференциальные сечения упругого и неупругого рассеяния ^3He на ядре ^9Be

В работах [23–25] в рамках МСК из анализа экспериментальных данных по неупругому рассеянию α -частиц для основного состояния ^9Be были извлечены значения параметра деформации β_2 в пределах 0,64–0,89. В работе [26] при анализе неупругого рассеяния ^3He с энергией 30 МэВ на ядре ^9Be с возбуждением уровня 2,43 МэВ ($5/2^-$) была получена длина деформации $\delta_2 = 1,97$ Фм. Наши результаты по длине деформации (δ_2) и параметру квадрупольной деформации (β_2) существенно меньше. Расхождения, скорее всего, связаны с неоднозначным выбором параметров ОП.

Как видно из рисунков 3 и 4, расчеты по методу связанных каналов (синие кривые) дают хорошее описание экспериментальных сечений по рассеянию α -частиц и ^3He при энергиях налетающих частиц в

области углов передней полусферы. Однако на больших углах (более 120°) теоретические сечения ниже экспериментальных значений. Это указывает на необходимость учета других механизмов помимо потенциального рассеяния.

Кластерная структура ядра ^9Be может приводить к модификации заселения возбужденных состояний. Анализ показал, что влияние механизма кластерного возбуждения невелико, и поэтому этот механизм не учитывался в окончательных расчетах. Рост сечений под большими углами можно связать с вкладом обменных процессов с передачей кластеров ^5He и ^6He в рассеянии α -частиц и ^3He , соответственно. Роль механизма обмена кластерами в рассеянии и реакция обсуждается в работах [27–29].

Диаграммы этих процессов показаны на рисунке 5.

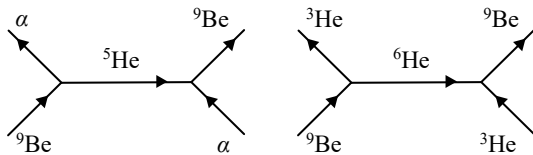


Рисунок 5. Диаграммы механизмов обмена кластеров ^5He и ^6He в рассеянии α -частиц и ^3He на ядре ^9Be

В программе FRESKO спектроскопическая амплитуда задается для каждого орбитального момента относительного движения между валентной и составной частицей и полного момента j , уносимого валентной частицей. Необходимые для расчетов вклада обменного процесса спектроскопические амплитуды рассчитаны в рамках трансляционно-инвариантной модели оболочек [30, 31] и представлены в таблице 3.

Таблица 3. Спектроскопические амплитуды (СА) кластеров ^5He и ^6He в ядре ^9Be

	I	J	СА
$^9\text{Be}(3/2^-) \rightarrow \alpha + ^5\text{He}$	0	3/2	0,74
	2	3/2	-0,78
$^9\text{Be}(5/2^-) \rightarrow \alpha + ^5\text{He}$	2	5/2	0,81
	4	5/2	0,33
$^9\text{Be}(7/2^-) \rightarrow \alpha + ^5\text{He}$	2	7/2	0,32
	4	7/2	0,34
$^9\text{Be}(3/2^-) \rightarrow ^3\text{He} + ^6\text{He}$	1	1	-0,46
	1	2	-0,276
	3	2	-0,092
$^9\text{Be}(5/2^-) \rightarrow ^3\text{He} + ^6\text{He}$	3	2	0,29
	3	3	-0,055

Надо отметить, что расчеты сечений для обменного механизма осложняются тем, что тяжелые кластеры ^5He и ^6He могут передаваться не только в основном, но и в возбужденном состояниях, спектроскопические амплитуды которых известны с недостаточной точностью. Это приводит к неопределенностям в расчетах. Поэтому для грубой оценки мы рассматри-

вали процесс передачи кластеров ^5He и ^6He только в основных состояниях.

На рисунках 3 и 4 дифференциальные сечения, отвечающие обменному механизму передачи кластеров, показаны зелеными кривыми. Красные кривые представляют собой дифференциальные сечения рассеяния α -частиц и ^3He с учетом вклада обменного механизма передачи. Из рисунков видно, что сечения, вычисленные в рамках МСК для обеих налетающих частиц (α и ^3He) и для всех энергий, достаточно хорошо согласуются с экспериментом. Учет механизма обмена кластерами увеличивает сечения рассеяния на углах более 130° .

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В рамках оптической модели проанализированы существующие экспериментальные данные по упругому рассеянию α -частиц и ^3He в широкой области энергий налетающих частиц от 18 до 100 МэВ. Найдены оптимальные параметры оптических потенциалов.

С найденными потенциалами с использованием программы FRESKO методом связанных каналов проведен анализ упругого и неупругого рассеяния α -частиц при энергиях 45 МэВ и 50,5 МэВ, а также ^3He при энергиях 50 МэВ и 60 МэВ с возбуждением состояний 2,43 МэВ ($5/2^-$) и 6,38 МэВ ($7/2^-$). Извлечены значения параметров квадрупольной деформации $\beta_2 = 0,44$ и $\beta_2 = 0,21$ для состояний 2,43 МэВ ($5/2^-$) и 6,38 МэВ ($7/2^-$), соответственно. Оценен вклад в рассеяние обменного механизма с передачей кластеров ^5He и ^6He в рамках метода искаженных волн с конечным радиусом взаимодействия, включенного в программу FRESKO. Соответствующие спектроскопические амплитуды вычислены в рамках трансляционно-инвариантной модели оболочек.

Учет механизма обмена кластерами позволил описать экспериментальные угловые распределения упругого и неупругого рассеяния в полном угловом диапазоне. Вклад обменного механизма увеличивает сечения рассеяния на больших углах.

Сопоставление экспериментальных и расчетной угловой зависимости измеренных сечений подтвердили необходимость использования при анализе наряду с коллективной моделью ядра ^9Be 2-х частичные структуры $^9\text{Be} \rightarrow \alpha + ^5\text{He}$ и $^9\text{Be} \rightarrow ^3\text{He} + ^6\text{He}$, которые проявляют себя в обменном механизме реакции.

Благодарности

Работа выполнена при поддержке программы № BR23891530 (Развитие комплексных научных исследований в области ядерной и радиационной физики на базе ускорительных комплексов Казахстана) Министерства энергетики Республики Казахстан и выполнена в рамках государственного задания Института ядерной физики им. Скобелева, Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова, Москва, Российская Федерация.

ЛИТЕРАТУРА / REFERENCES

1. Von Oertzen W., Freer M., Kanada-En'yo Y. Nuclear clusters and nuclear molecules // *Physics Reports* – 2006. – Vol. 432 – P. 43.
2. Freer M., Horiuchi H., Kanada-En'yo Y., Lee D., Meibner Ulf-G. Microscopic clustering in light nuclei // *Reviews of Modern Physics*. – 2018. – Vol. 90. – P. 035004. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.90.035004>
3. Brown T.A.D., Papka P., Fulton B.R., Watson D.L., Fox S.P., Groombridge D., Freer M., Clarke N.M., Ashwood N.I., Curtis N., Ziman V., McEwan P., Ahmed S., Catford W.N., Mahboub D., Timis C.N., Baldwin T.D., Weisser D.C. Decay studies for states in ^9Be up to 11 MeV: Insights into the $n+^8\text{Be}$ and $\alpha+^5\text{He}$ cluster // *Phys. Rev.* – 2007. – Vol. 76. – P.054605.
4. Papka P., Brown T.A.D., Fulton B.R., Watson D.L., Fox S.P., Groombridge D., Freer M., Clarke N.M., Ashwood N.I., Curtis N., Ziman V., McEwan P., Ahmed S., Catford W.N., Mahboub D., Timis C.N., Baldwin T.D., Weisser D.C. Decay path measurements for the 2.429 MeV state in ^9Be : Implications for the astrophysical $\alpha + \alpha + n$ reaction // *Phys. Rev.* – 2007. – Vol. 75. – P. 045803.
5. Burda O., Neumann-Cosell P., Richter A., Forsen C., Brown B. A. Resonance parameters of the first $1/2^+$ state in ^9Be and astrophysical implications // *Phys. Rev.* – 2010. – Vol. 82. – P. 015808.
6. Konobeevski E.S., Afonin A.A., Zuyev S.V., Kasparov A.A., Mitcuk V.V., Mordovskoy M.V., Lebedev V.M. and Spassky A.V. Probing the cluster structure of a light nucleus with d ^9Be scattering // *Bulletin of the Russian Academy of Sciences Physics*. – 2019. – Vol.83. – P. 433.
7. Huang B.S., Ma Y.G. Dipole excitation of ^6Li and ^9Be studied with an extended quantum molecular dynamics model // *Phys.Rev.* – 2021. – Vol. 103. – P. 054318. <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.103.054318>
8. Starastin V., Demyanova A.S., Danilov A.N. Determination of the radii of states in the 11–14 MeV excitation region in the ^9Be nucleus // *Physics of Atomic Nuclei*. – 2023. – Vol. 86(4). – P. 445–449. <https://doi.org/10.1134/S10637788230403369>
9. Voronchev V.T., Kukulin V.I., Pomerantsev V.N., Razikov Kh.D., Ryzhikh G.G. Analysis of the structure and properties of nuclei with $A = 9$ (^9Be - ^9B) in the dynamic multicluster $2\alpha + N$ model // *Phys. Atomic Nuclei*. – 1994. – Vol. 57. – P. 1890.
10. Voronchev V.T., Kukulin V.I., Pomerantsev V.N. et al. Three-body calculations of $A=9$ nuclei with supersymmetric α - α potentials. // *Few-Body Systems*. – 1995. – Vol. 18. – P. 191.
11. Ибраева Е.Т., Жусупов М.А., Зайкин А.Ю., Сагиндыков Ш.Ш. Трех-частичная структура изобар с $A = 9$: Be , Li , C , и упругое рассеяние протонов // *Ядерная физика*, – 2009. – Т. 72. – С. 1777. [Ibraeva E.T., Zhusupov M.A., Zaykin A.Yu., Sagindykov Sh.Sh. Trekh-chastichnaya struktura izobar s $A = 9$: Be , Li , C , i uprugoe rasseyaniye protonov // *Yadernaya fizika*, – 2009. – Vol. 72. – P. 1777. (In Russ.)]
12. Bohr A., Mottelson B.R. Nuclear Structure / New York – 1974. – Vol. II.
13. Tilley D.R., Kelley J.H., Godwin J.L., Millener D.J., Purcell J., Sheu C.G. and Weller H.R. Energy Levels of Light Nuclei $A = 9$ // *Nucl. Phys. A*. – 2004. – Vol. 745. – P. 155.
14. Taylor R.B., Fletcher N.R., Davis R.H. Elastic scattering of 4-20 MeV alpha Particles by ^9Be // *Nucl.Phys.* – 1965. – Vol. 65. – P. 318.
15. Буртебаев Н. Исследование механизма упругого рассеяния α -частиц на ядре ^9Be // *ВАНТ, Физика ядерных реакторов*. – 2002. – № 1. – С. 137–142. [Burtebayev N. Issledovanie mekhanizma uprugogo rasseyaniya α -chastits na yadre ^9Be // *VANT, Fizika yadernykh reaktorov*. – 2002. – No. 1. – P. 137–142. (In Russ.)]
16. Дуйсебаев А. и др. Аномальное рассеяние 50 МэВ α -частиц на ядрах ^9Be , ^{12}C , ^{13}C // *Изв. АН Каз. ССР. Сер. физ.-мат.* – 1978. – № 4. – С.13. [Duysebaev A. i dr. Anomalnoe rasseyaniye 50 MeV α -chastits na yadrah ^9Be , ^{12}C , ^{13}C // *Izv. AN Kaz. SSR. Ser. fiz.-mat.* – 1978. – No. 4. – P.13. (In Russ.)]
17. Hauser G., Lohken R., Rebel H. et.al. Elastic scattering of 104 MeV alpha particles // *Nucl. Phys. A*. – 1968. – Vol. 128. – P. 81.
18. Janseitov D.M., Lukyanov S.M., Mendibayev K. et al. Investigation of the elastic and inelastic scattering of ^3He from ^9Be in the energy range 30-60 MeV // *International Journal of Modern Physics E*. – 2018. – Vol. 10 – P. 1850089. <https://doi.org/10.1142/S0218301318500891>
19. Адодин В.В., Дуйсебаев А.Д., Буртебаев Н. Радужные эффекты в процессах рассеяния и реакции ($^3\text{He}, \alpha$) на ядрах ^9Be , $^{12,13}\text{C}$, ^{14}N , ^{16}O при энергиях ионов ^3He 50 и 60 МэВ // *Ядерная физика*. – 1992. – № 3. – С. 577. [Adodin V.V., Duysebaev A.D., Burtebayev N. Raduzhnye efekty v protsessakh rasseyaniya i reaktcii ($^3\text{He}, \alpha$) na yadrah ^9Be , $^{12,13}\text{C}$, ^{14}N , ^{16}O pri energiyakh ionov ^3He 50 i 60 MeV // *Yadernaya fizika*. – 1992. – No. 3. – P. 577. (In Russ.)]
20. Thompson I.J / FRESCO, Department of Physics, University of Surrey, July 2006, GuildfordGU27XH, England. version FRESCO 2.0. URL: <http://www.fresco.org.uk/>
21. Nolte M., Machner H., Bojowald J. Global optical potential for α -particles with energies above 80 MeV // *Phys. Rev. C* – 1987. – Vol. 36. – P. 1312.
22. Буртебаев Н., Бактыбаев М.К., Дуйсебаев Б.А., Сахiev С.К., Керимкулов Ж.К., Мукашев К.М., Исабекова Г.С. Анализ рассеяния ионов ^3He и α -частиц на ядрах ^7Li , ^9Be и ^{11}B при энергиях 10–20 МэВ/нуклон // *Вестник КазНПУ им. Абая*. – 2007. – № 1. – С. 49–56. [Burtebayev N., Baktybaev M.K., Duysebaev B.A., Sakhiev S.K., Kerimkulov Zh. K., Mukashev K.M., Isabekova G.S. Analiz rasseyaniya ionov ^3He i α -chastits na yadrah ^7Li , ^9Be i ^{11}B pri energiyakh 10-20 MeV/nuklon // *Vestnik KazNPU im. Abaya*. – 2007. – No. 1. – P. 49–56. (In Russ.)]
23. Roy S., Chatterjee J. M. and Majumdar H. Coupled channel folding model description of a scattering from Be // *Phys. Rev. C*. – 1995. – Vol. 52. – P. 1524.
24. Lukyanov S.M., Denikin A.S., Voskoboynik E.I. Study of internal structures of $^9,^{10}\text{Be}$ and ^{10}B in scattering of ^4He from ^9Be // *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* – 2014. – Vol. 41. – P. 035102. <https://doi.org/10.1088/0954-3899/41/3/035102>
25. Harakeh M.N., van Popta J., Saha A. and Siemssen R.H. Strong coupled-channels effects in the $^9\text{Be}(\alpha, t)^{10}\text{B}$ reaction // *Nucl. Phys. A*. – 1980. – Vol. 15. – P. 344.
26. Urazbekov B.A., Issayev T., Lukyanov S.M., Azhibekov A., Denikin A.S., Mendibayev K., Janseitov D.M.,

- Penionzhkevich Yu.E., Kuterbekov K.A., Zholdybayev T.K. Reaction induced by 30 MeV beam on ^9Be : cluster transfer reactions // Chinese Physics. – 2024. – Vol. 48. – P. 014001.
27. Теплов И.Б., Зеленская Н.С., Лебедев В.М., Спасский А.В. Обратные максимумы сечений в ядерных реакциях и обменные процессы // ЭЧАЯ. – 1977. – Т. 8. – С. 769. [Teplov I.B., Zelenskaya N.S., Lebedev V.M., Spasskiy A.V. Obratnye maksimumy secheniy v yadernykh reaktsiyakh i obmennye protsessy // EChAYa. – 1977. – Vol. 8. – P. 769. (In Russ.)]
28. Гриднев К.А., Оглоблин А.А. Аномальное рассеяние назад и квази-молекулярная структура ядер // ЭЧАЯ. – 1975. – Т. 6. – С. 393. [Gridnev K.A., Ogloblin A.A. Anomal'noe rasseyaniye nazad i kvazi-molekulyarnaya struktura yader // EChAYa. – 1975. – Vol. 6. – P. 393. (In Russ.)]
29. Madansky L., Oven G.E. Heavy particle stripping // Phys. Rev. – 1955. – Vol. 91. – P. 99. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.99.1608>
30. Балашов В.В., Неудачин В.Г., Смирнов Ю.Ф., Юдин Н.П. Приведенные ширины для нуклонных ассоциаций в модели оболочек // ЖЭТФ. – 1959. – Т. 37. – С. 1385. [Balashov V.V., Neudachin V.G., Smirnov Yu.F., Yudin N.P. Privedennyye shiriny dlya nuklonnykh assotsiatsiy v modeli obolochek // ZhETF. – 1959. – Vol. 37. – P. 1385. (In Russ.)]
31. Немец О.Ф., Неудачин В.Г., Рудчик А.Т., Смирнов Ю.Ф., Чувильский Ю.М. Нуклонные ассоциации в атомных ядрах и ядерные реакции многонуклонных передач / Киев. «Наукова Думка». – 1988. [Nemets O.F., Neudachin V.G., Rudchik A.T., Smirnov Yu.F., Tchuvil'skiy Yu.M. Nuklonnye assotsiatsiy v atomnykh yadrakh i yadernye reaktsiy mnogonuklonnykh peredach / Kiev. "Naukova Dumka". – 1988. (In Russ.)]

^9Be ЯДРОЛАРЫНДА α -БӨЛШЕКТЕР ЖӘНЕ ^3He ШАШЫРАУЫН ОПТИКАЛЫҚ МОДЕЛЬ ЖӘНЕ БАЙЛАНЫСҚАН АРНАЛАР ӘДІСІ ШЕҢБЕРІНДЕ ЭНЕРГИЯНЫҢ КЕҢ АЙМАҒЫНДА ТАЛДАУ

К. А. Талпакова^{1,2,*}, Н. Буртебаев¹, Л. И. Галанина³, Маулен Насурлла^{1,4}, С. Б. Сакута⁵, С. Қ. Сахнев¹, Маржан Насурлла¹, Р. А. Ходжаев¹, Д. А. Исаев^{1,4}, А. Қ. Нұрпейсов^{1,4}, С. А. Турганова^{1,4}

¹ ҚР Атом энергиясы жөніндегі агенттігінің «Ядролық физика институты» РМК, Алматы, Қазақстан

² Л.Н. атындағы Еуразия ұлттық университеті, Гумилев, Астана, Қазақстан

³ М.В. Ломоносов атындағы Мәскеу мемлекеттік университеті,

Скобелев атындағы Ядролық физика институты, Мәскеу, Ресей

⁴ Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан

⁵ ҰЗО «Курчатов институты», Мәскеу, Ресей

* Байланыс үшін E-mail: tkk_777@mail.ru

^9Be ядроларында α -бөлшектер мен ^3He серпімді шашырауы бойынша эксперименттік деректерді оптикалық модель бойынша энергияның кең аймағында (18–100 МэВ) талдау жүргізілді. Оптикалық потенциалдардың онтайлы параметрлері табылды. Осы потенциалдарды қолданып, байланысқан арналар әдісімен ^9Be ядросының 2,429 МэВ ($5/2^-$) және 6,38 МэВ ($7/2^-$) қозған ұжымдық күйлерін α -бөлшектердің 45 және 50 МэВ және ^3He 50 және 60 МэВ энергияларындағы серпімді және серпімсіз шашыраудың бұрыштық үлестірімдері талданды. Квадрупольді деформация параметрлерінің мәндері алынды. ^5He және ^6He кластерлерімен алмасу механизмі және кластерлік құрылымның ядроның қозуына қосқан үлесі бағаланды.

Түйін сөздер: ^9Be ядросы, α -бөлшектер, ^3He , оптикалық модель, байланысқан арналар әдісі, квадрупольді деформация.

ANALYSIS OF SCATTERING OF α -PARTICLES AND ^3He ON ^9Be NUCLEI
IN A WIDE RANGE OF ENERGIES WITHIN THE FRAMEWORK OF THE OPTICAL MODEL
AND THE COUPLED CHANNEL METHOD

K. A. Talpakova^{1,2*}, N. Burtebayev¹, L. I. Galanina³, Maulen Nassurla^{1,4}, S. B. Sakuta⁵, S. K. Sakhiyev¹,
Marzhan Nassurla¹, R. A. Khojayev¹, D. A. Issayev^{1,4}, A. K. Nurpeisov^{1,4}, S. A. Turganova^{1,4}

¹ RSE “Institute of Nuclear Physics” of the Agency of the Republic of Kazakhstan for Atomic Energy, Almaty, Kazakhstan

² L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

³ Lomonosov Moscow State University, Skobeltsyn Institute of Nuclear Physics, Moscow, Russia

⁴ Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan

⁵ National Research Center “Kurchatov Institute”, Moscow, Russia

* E-mail for contacts: tkk_777@mail.ru

The analysis of the existing experimental data on the elastic scattering of α -particles and ^3He on ^9Be nuclei in a wide energy range (18–100 MeV) is carried out using the optical model of the nucleus. Optimal parameters of optical potentials are found. With these potentials, the measured angular distributions of elastic and inelastic scattering at α -particle energies of 45 and 50 MeV and ^3He with energies of 50 and 60 MeV with excitation of collective states of 2.429 MeV ($5/2^-$) and 6.38 MeV ($7/2^-$) of the ^9Be nucleus were analyzed using the coupled channel method. The values of the quadrupole deformation parameters are extracted. The contribution of the cluster structure and the mechanism of cluster exchange ^5He and ^6He to the excitation of the nucleus is estimated.

Keywords: ^9Be nucleus, α -particles, ^3He , optical model, coupled channel method, quadrupole deformation.

<https://doi.org/10.52676/1729-7885-2025-4-20-28>

УДК: 621.384.6; 537.862; 538.91

DEVICE FOR FAST INTERRUPTION OF ACCELERATED ION BEAM AT DC-60 AND IC-100 CYCLOTRONS

**M. V. Koloberdin^{1,2*}, I. A. Ivanov^{1,2}, L. Pavlov³, A. Isatov³,
S. Mitrofanov³, V. A. Skuratov³, M. V. Zdorovets^{1,2}, B. C. Amanzhulov^{1,2}**

¹ RSE “Institute of Nuclear Physics” of the Agency of the Republic of Kazakhstan for Atomic Energy, Almaty, Kazakhstan

² NJSC “L.N. Gumilyov Eurasian National University”, Astana, Kazakhstan

³ Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia

* E-mail for contacts: koloberdin@inp.kz

To study the optical properties of irradiated solids at the early stages of defect structure formation, there is a need to improve the time resolution of the recorded ionoluminescence and to record particles interacting with the sample with a smaller energy spread. The article describes the developed system of a fast beam chopper, which is based on deflection plates placed in the channel of the axial injection of an accelerator, immediately before the injection of the ion beam into the magnetic resonance system of the accelerator. Chopper affects the constant flow of ions in the axial injection, obtained from the ion source and injected into the accelerator and deflects it with a frequency necessary to form the required number of bunches at the exit of the accelerator. Chopper allows to obtain a beam of charged particles with different time parameters on the DC-60 and IC-100 accelerator complexes, the resonance systems of which operate in the frequency range from 11 MHz to 22 MHz and, when accelerating ions, produce particle flows at the accelerator output, grouped into bunches with a duration of about $\sim 2 \dots 5$ ns and a repetition period of $\sim 90 \dots 45$ ns. This chopper uses a fast switch of high voltage supplied to the deflection plates, at which the ion flow is deflected at the right time from injection into the accelerator, thereby ensuring effective rarefaction of the number of bunches and, accordingly, the ion flow from 100% to 1%, down to single bunches.

Keywords: cyclotron; chopper; interrupter; high voltage switch; ionoluminescence.

INTRODUCTION

Experiments to study the properties of irradiated materials in real-time, or in-situ, are among the most informative in the radiation physics of solids. Such works include studies of the spectral composition and kinetics of luminescence generated by high-energy heavy charged particles – ionoluminescence (IL) [1]. The IL method allows studying processes associated with defect development in-situ, obtaining information from a depth of up to several micrometers at ion energies of more than several MeV [1], as well as identifying impurities in crystals [2], indicating implantation defects and phase transitions [3]. Experiments on ionoluminescence have already been conducted at the DC-60 and IC-100 accelerators, for example, on the study of radiation defects in Al_2O_3 [4] and LiF using IL [5]. This paper demonstrates the possibility of using a chopper for research in the field of ionoluminescence and radiation materials science at the DC-60 and IC-100 accelerators with improved beam time characteristics that were previously unavailable. The DC-60 accelerator allows researchers to produce ion beams from Li to Xe with the ion energy starting from 0.35 up to 1.75 MeV/nucleon [6]. A chopper (from the English “chopper” – interrupter) is a device for fast interruption of the particle beam [7]. Choppers are used to separate individual bunches from the beam for purposes such as beam intensity adjustment, radioisotope research, and time-of-flight measurements of protons and neutrons [7–10]. Changes in the ionoluminescence spectra and their intensity result from processes occurring in a broad time

range, from the relaxation of electron excitations to the formation of complexes of radiation defects, such as color centers [4, 11]. Registration of time characteristics in the picosecond range assumes excitation of optical radiation by single ions, as, for example, in [12, 13] due to the absence of accelerators producing ultrashort pulses of charged particles. To analyze luminescence decay curves at large time lengths, pulses (bunches) of particles with a duration of units or tens of nanoseconds [4], as well as groups of such pulses can be used, provided that the characteristic luminescence time significantly exceeds the duration of the bunch/group of bunches. The formation of periodic excitation pulses of a given duration can be implemented using an ion beam chopper. This makes it possible to study the kinetics of IL with the required time resolution in various time intervals [4]. In addition, the chopper can also be used to interrupt the ion flow in experiments on studying the processes of phosphorescence (afterglow) caused by the action of accelerated ion beams [14, 15]. It should be noted that the results of such studies of chopper application for IL are presented in the literature by a very limited number of publications.

This work is dedicated to the development of a device for fast interruption of the ion flow at the DC-60 and IC-100 cyclotrons for applied research [16, 17], as well as a detector of starting signals in the experiments to study the kinetics of high-energy ionoluminescence of crystals such as Al_2O_3 , MgAl_2O_4 and MgO .

METHODS

The chopper was tested on the DC-60 heavy ion accelerator at the Astana branch of the Institute of Nuclear Physics (Astana, Kazakhstan) and IC-100 heavy ion accelerator (Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia). A microchannel plate (MCP) detector was used for generating starting signals in the studies of decay curves of luminescence stimulated by single high-energy ions. Signals from a microchannel plate (MCP) detector were measured using the Tektronix MD03102 mixed domain oscilloscope. The working principle of the developed chopper and detector system based on MCP is discussed in further detail in the following sections.

RESULTS AND DISCUSSION

Device for fast interruption of the beam

The chopper consists of two plane-parallel plates installed in the axial injection channel of the cyclotron inside the vacuum volume of the IM90 bending magnet (Figures 1a, 1b), directing the ion beam from the ECR

(Electron Cyclotron Resonance) source channel to the electrostatic inflector in the accelerator chamber of DC-60 or IC-100. These cyclotrons have similar axial injection elements, in particular the bending analyzing magnet, as well as a similar structure of axial injection of the ion beam.

The beam interruption required to form pulsed ion beams in specified time intervals occurs due to its deflection in the electric field of the chopper. The functional diagram of the chopper control system is shown in Figure 2. It includes a control device, which, depending on the operating mode and degree of beam rarefaction specified by the operator, supplies high-voltage pulses (HV pulse) to the chopper plates. The control device is matched with the cyclotron resonance system using a signal generator. The key element of the system – the control device – includes a high-voltage DC power source and a high-voltage pulse switch.

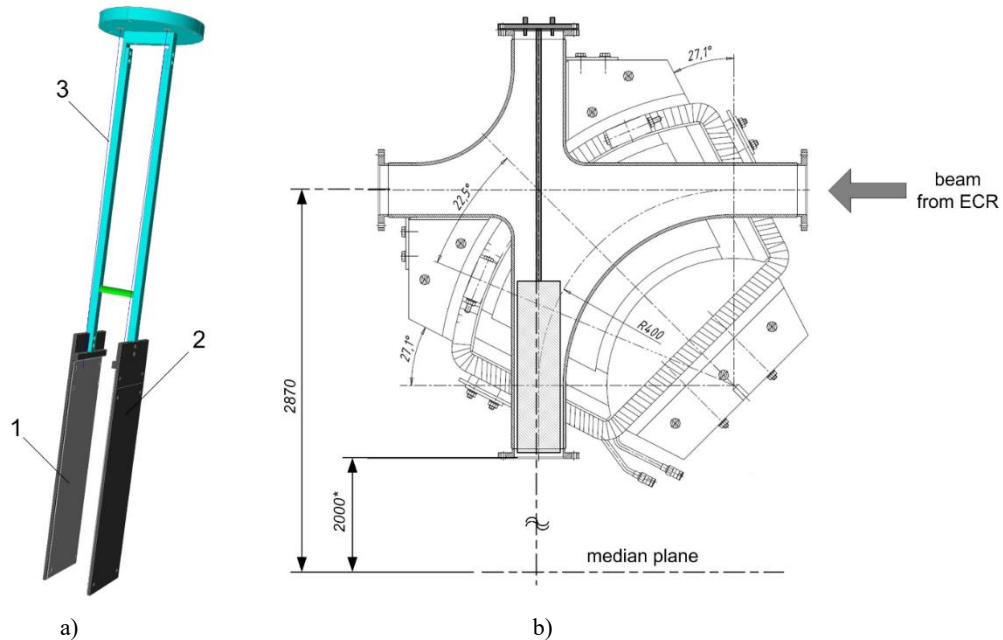


Figure 1. Diagram of the chopper: (a) design: 1 – deflecting plate, 2 – isolator, 3 – power cord; (b) installation in the channel of axial injection of the cyclotron

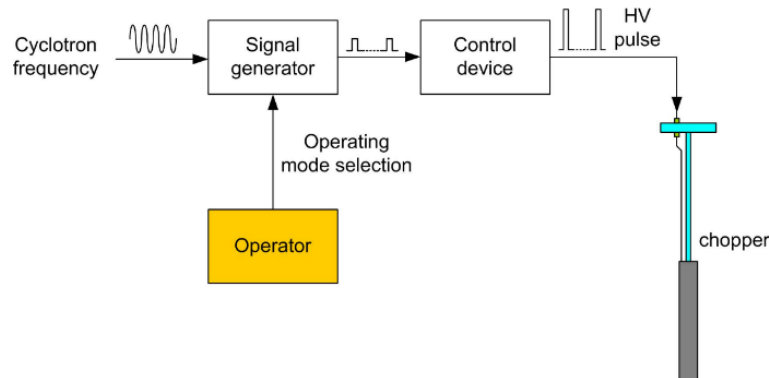


Figure 2. Functional diagram of the chopper control

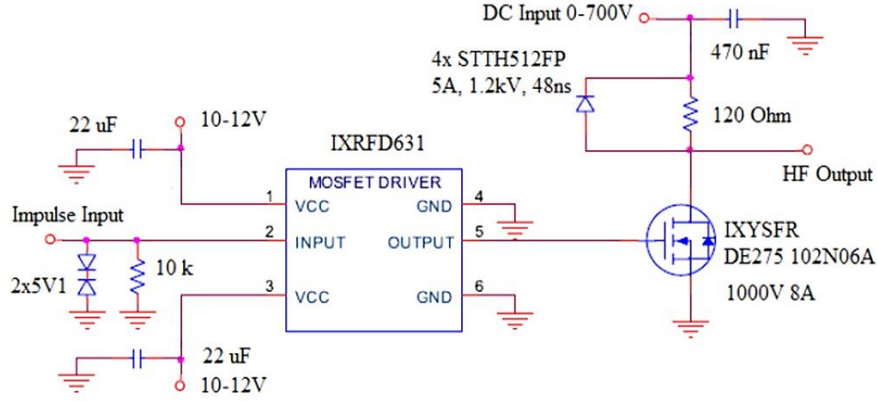


Figure 3. Circuit diagram of the high voltage pulse switch

The high voltage switch is based on the RF Power MOSFET DE275-102N06A transistor controlled by the IXRFD631 driver [18], shown in Figure 3. It can generate high voltage pulses with an amplitude of up to 500 V. The time of the control signal coming from the master signal generator to the fast control transistor of the chopper control device for its short-term opening is determined as:

$$t_{ONDLY} + t_R + t_{OODLY} + t_F = 56 \text{ (ns)} \quad (1)$$

Here t_{ONDLY} is the turn-on signal propagation delay (ns), t_R is the signal rise time (ns), t_{OODLY} is the turn-off signal propagation delay (ns), t_F is the signal fall time (ns).

The minimum duration of the control signal of the driver itself $PW_{MIN} = 8 \text{ ns}$ can be neglected, since it is much less than the required duration of the general control signal and less than the bunch repetition period. The opening time of the DE275-102N06A control transistor [19] is defined in a similar way:

$$t_{d(on)} + t_{on} + t_{d(off)} + t_{off} = 14 \text{ (ns)}, \quad (2)$$

where $t_{d(on)}$ is the turn-on signal propagation delay (ns), t_{on} is the signal turn-on time (ns), $t_{d(off)}$ is the turn-off signal propagation delay (ns), t_{off} is the signal turn-off time (ns). Thus, the delay time of the chopper control device electronics operation is estimated at $56 + 14 = 70 \text{ ns}$. This is comparable with the period of the cyclotron frequency, for example $\sim 60 \text{ ns}$ (16.650 MHz) of the DC-60 cyclotron or $\sim 44 \text{ ns}$ (22.870 MHz) of the IC-100 cyclotron. Let us consider whether it is possible with such a duration of the control signal to isolate individual bunches of ion beams, such as krypton $^{84}\text{Kr}^{15+}$ and xenon $^{132}\text{Xe}^{22+}$.

Therefore, for example, in the operating range of the parameters of the cyclotron ECR ion source at an accelerating voltage of $U_{ECR} = 17 \text{ kV}$ for xenon-132 ions (mass $m = 131.9$ atomic mass units (amu)) with a charge $Z = 22+$, which corresponds to their initial kinetic energy $T = 373.5 \text{ keV}$, the ion velocity v_{x0} in the axial injection channel will be:

$$v_{x0} = \sqrt{\frac{2ZeU_{ECR}}{m}} = 7.392 \cdot 10^5 \text{ m/s}. \quad (3)$$

At a chopper operating voltage of $U_{ch} = 300 \text{ V}$ with a length of deflecting elements $l = 350 \text{ mm}$, installed at a distance of $d = 80 \text{ mm}$, the maximum deviation Z_{max} of the xenon ion trajectory can be calculated using equations of motion for non-relativistic particles and electrostatic force from the deflecting elements:

$$Z_{max} = \frac{ZeE_z l^2}{2mv_{x0}^2} = 6.8 \text{ mm}, \quad (4)$$

where E_z is the electric field strength between the chopper's plates, which corresponds to a maximum angle of departure of 2.2° . Considering the length of the "flight base" – the length of the particle path from the chopper to the inflector installed in the median plane of the main cyclotron magnet (Figure 1b) – 2.4 m , the maximum deflection of the ion beam will be more than 86 mm , which ensures a total deflection of the particle flow in the injection channel from entering the inflector input window equal to 10 mm , thereby guaranteeing the formation of the required time intervals of ion flows.

The parameters for krypton-84 ions with charge $Z = 15+$ were obtained in a similar manner, corresponding to the initial kinetic energy $T = 254.7 \text{ keV}$, velocity $7.653 \cdot 10^5 \text{ m/s}$, maximum trajectory deviation in the chopper of 6.8 mm , departure angle of 2.2° , maximum ion beam deviation on the flight path of more than 86 mm .

The developed device was tested in ionoluminescence experiments on the DC-60 and IC-100 accelerators. The measurements were carried out on spinel (MgAl_2O_4) single crystal samples with different temporal structures (beam rarefaction levels), varied using a chopper. Figures 4a–c show, as an example, oscillograms of signals from a microchannel plate (MCP) detector generating start pulses when measuring luminescence decay curves for the transmission of 5%, 15%, and 50% of bunches of a 156 MeV xenon ion beam on the IC-100 cyclotron. The signals were recorded with an MD03102 digital oscilloscope. The control signal to the chopper control device was supplied from an AFG3152C type generator. Therefore, to transmit 5% of the bunches, the duration of the control signal was set to $4.6 \mu\text{s}$.

The operating mode was selected so that the chopper was initially in the “closed” state, i.e. high voltage was applied to it, and when the control signal was sent, the chopper “opened” for subsequent acceleration. The chopper operating period, i.e. the control signal repetition period was chosen equal to 2.287 kHz (1:10000 of cyclotron frequency of 22.870 MHz, when conducting a series of experiments on the IC-100 cyclotron). Therefore, for transmitting 5% of the beam (a total of about 500 bunches out of 10000), the duration of the packet of pulses registered with the MCP of about 18.5 μ s was obtained (the duration between markers a and b in Figure 4a).

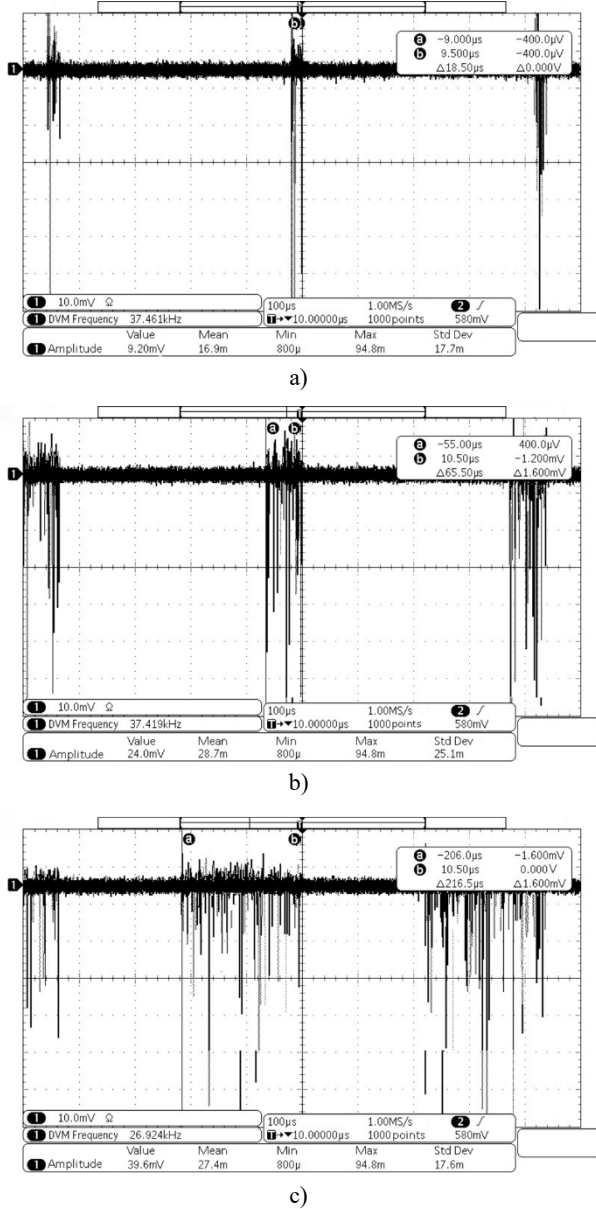


Figure 4. Temporal structure of the Xe ion beam at 5% (a), 15% (b) and 50% (c) bunch transmission at the IC-100 accelerator

With such a packet duration, the calculated number of bunches is 423, which corresponds to about 5% of the

total ion flow. Figures 4b and 4c show similar oscillograms for transmitting 15% and 50% of the beam bunches, with a control signal duration of 5.1 μ s and 8.7 μ s, respectively.

Similar measurements were carried out at the DC-60 cyclotron with similar equipment using a similar technique, except for the control signal generator. The control signal to the chopper control device was fed from a 33500B type generator. Figures 5a–b show, as an example, the oscillograms of signals when transmitting 5% of bunches of a beam of xenon ions with an energy of 231 MeV at the DC-60 cyclotron. The chopper operating frequency was chosen to be 16.650 kHz (1:1000 of the cyclotron frequency of 16.650 MHz when conducting a series of experiments at the DC-60 cyclotron), while corresponding period was around 60.29 μ s as shown between markers a and b in Figure 5a. To transmit 5% of the bunches, the control signal duration was set to 3.4 μ s, so with a limited beam transmission (only about 50 bunches out of 1000), the pulse packet duration recorded by the detector was about 2.95 μ s (the duration between markers a and b in Figure 5b). With this packet duration, the calculated number of bunches is 49, which corresponds to about 5% of the total ion flux.

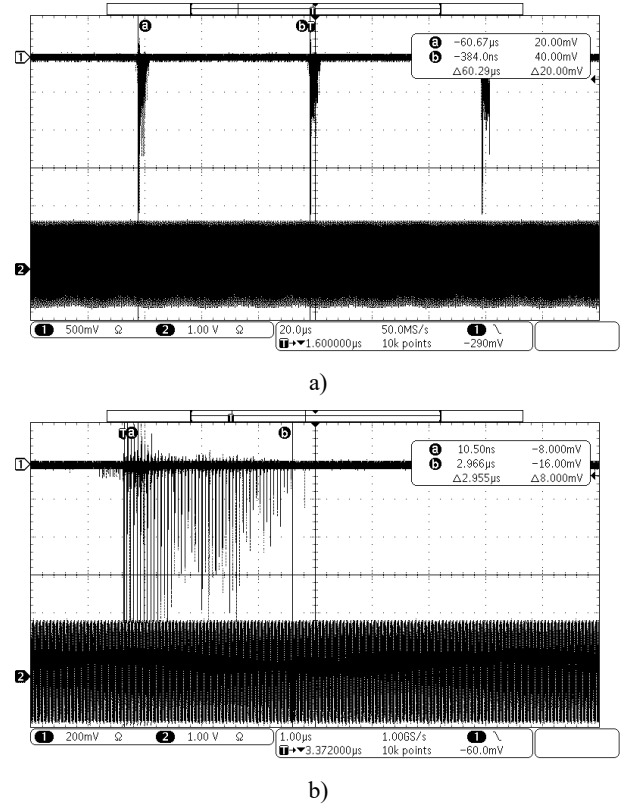


Figure 5. Temporal structure of the Xe ion beam with 5% bunch transmission, at the DC-60 accelerator. Here: a) signal with a chopper operating period, b) pulse packet duration, recorded by the MCP detector. Marker “1” is the signal from the detector, marker “2” is the sinusoidal signal of the cyclotron frequency

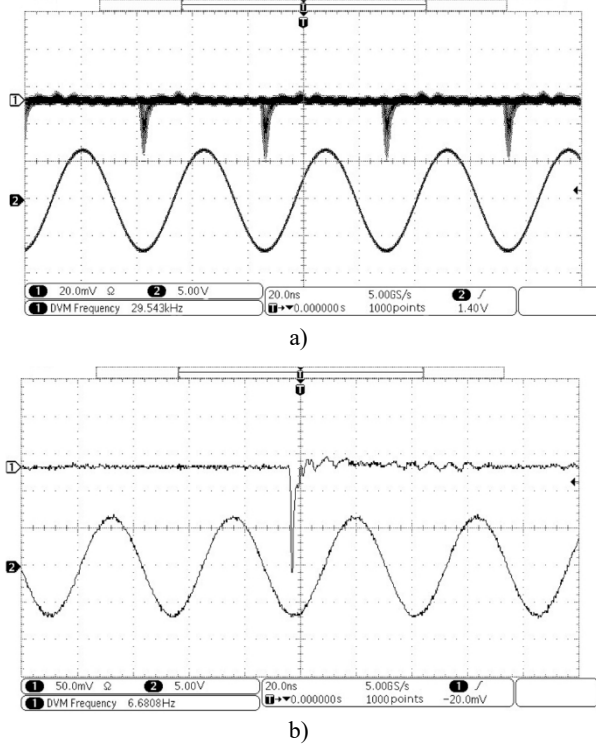


Figure 6. Registration of signals: (a) without a chopper and (b) with a chopper when isolating a single bunch of the beam at IC-100. The degree of rarefaction of the beam is 1%. Marker "1" is the signal from the detector, marker "2" is the sinusoidal signal of the cyclotron frequency.

An example of oscillograms demonstrating two modes of operation of the chopper with the transmission of all bunches and a single bunch of the beam at the IC-100 accelerator is shown in Figure 6. The signal of the cyclotron frequency of 22.870 MHz (sinusoid) of the resonant system of the accelerator is also shown here below with a marker "2". The scale interval (Figure 6a, b) for the duration of the signal is 20 ns, therefore, the signal from one bunch relative to the cyclotron frequency corresponding to a period of 43.4 ns is visible in the figure.

Figure 7 shows an oscillogram demonstrating the chopper operation mode with the transmission of one bunch of the beam at the DC-60 accelerator. The marker "2" also shows the signal of the cyclotron frequency of 16.650 MHz (sinusoid) of the resonance system of the DC-60 accelerator. The scale interval (Figure 7) for the signal duration is 40 ns, therefore the figure shows the signal from one bunch relative to the cyclotron frequency corresponding to a period of 60 ns, with a beam rarefaction degree of no more than 1.5%.

The above data demonstrate the capabilities of the chopper to change the temporal structure of a high-energy ion beam and to perform measurements using both single bunches and single ions if the particle flow density is much lower than the bunch frequency. Chopper allowed obtaining a beam of ions with different time parameters on the DC-60 and IC-100 accelerator complexes, the resonance systems of which operate in the frequency range from 11 MHz to 22 MHz and, when accelerating ions, produce particle flows at the accelerator output, grouped into bunches with a duration of about ~2...5 ns and a repetition period of ~90...45 ns.

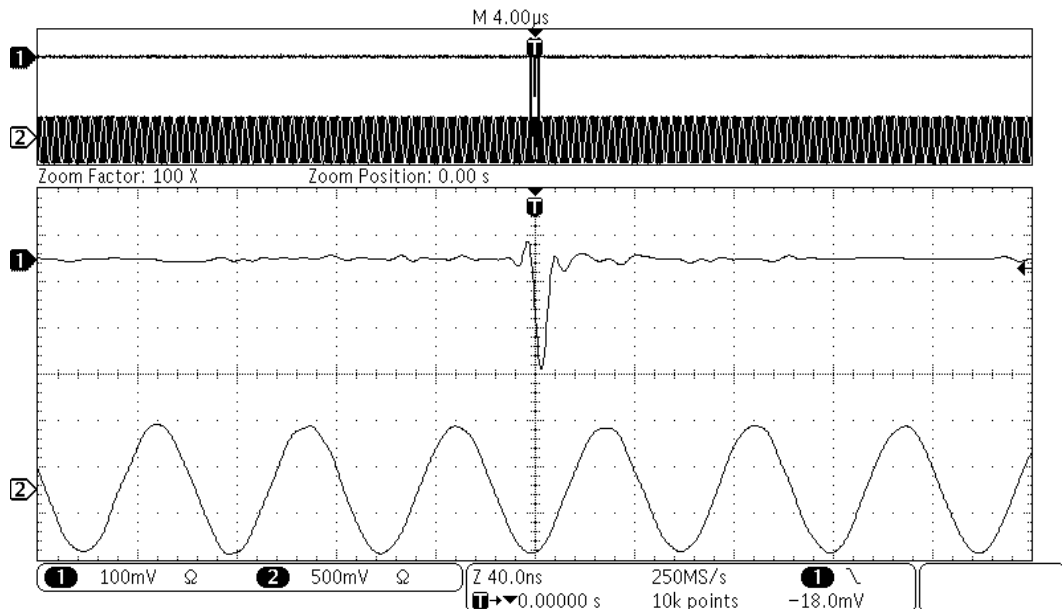


Figure 7. Signal registration with a chopper when isolating one bunch of the beam at the DC-60 accelerator. The degree of beam rarefaction is no more than 1.5%. Marker "1" is the signal from the detector, marker "2" is the sinusoidal signal of the cyclotron frequency. The range of the signal registration period is additionally shown at the top, with a display of 100 times magnification, i.e. one bunch in a period of about 4 μ s

Detector of starting signals in ionoluminescence experiments

This section describes a device for generating starting signals in the studies of curves of luminescence decay stimulated by single high-energy ions. In all previously conducted experiments, detectors based on the MCP [13, 20] were used for this purpose, located at some distance in front of the sample (Figure 8a). The signal in such detectors is formed due to electron emission from the carbon foil, which occurs when high-energy ions pass through it. As a result, the function of instrumental (time) resolution, in addition to the parameters of the detectors and electronics, is also determined by the ion dispersion by energy due to scattering on the foil in addition to that already present in the original beam, which, as a rule, is not less than 1%, which is typical for all cyclic accelerators. The electrons emitted from the foil are detected by the MCP, which generates the “start” signal for launching the luminescence lifetime measurements. Photons produced from the sample irradiated with ions are detected by a photomultiplier (PMT) and generate the “stop” signal. A TimeHarp 260 time-correlated single photon counting board (TDC) is used to construct the curves of ionoluminescence decay.

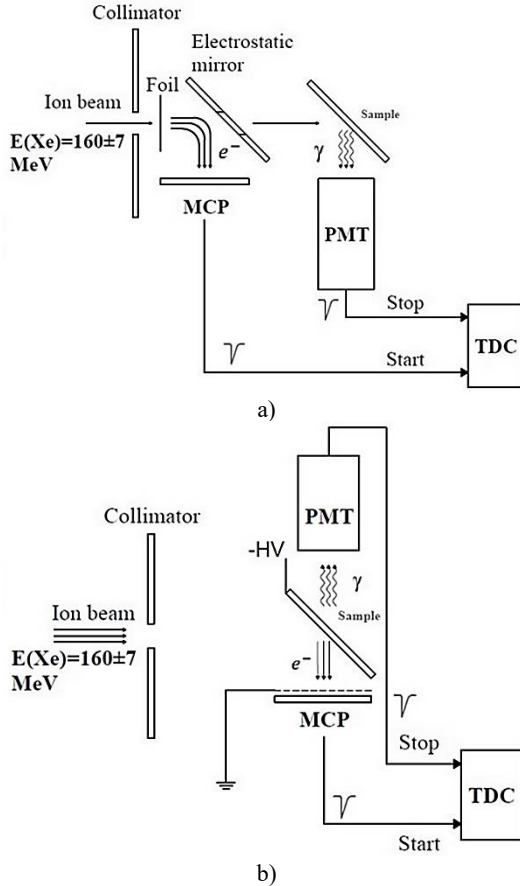


Figure 8. Block diagram of a device for measuring luminescence decay curves during irradiation with single high-energy ions: a) design in previous experiments, b) proposed design

In the design that we have proposed (Figure 8b), the difference is that the emission of electrons from the surface of the irradiated sample, onto which a thin (20 nm) metal film is deposited by vacuum deposition, is used to generate starting pulses. A conductive layer with a thickness much smaller than the wavelength of radiation in the visible region, which has virtually no effect on the photon yield, is necessary to create a uniform electric field on the target surface and prevent charge accumulation in the dielectric. This method virtually eliminates the effect of ion energy dispersion on the measurement of luminescence decay curves. An important feature of the design is that both detectors, MCP and PMT, as well as the sample, are mounted on a single standard DN-100 vacuum flange, which allows experiments to be carried out on any accelerator in standard ion beam diagnostic blocks.

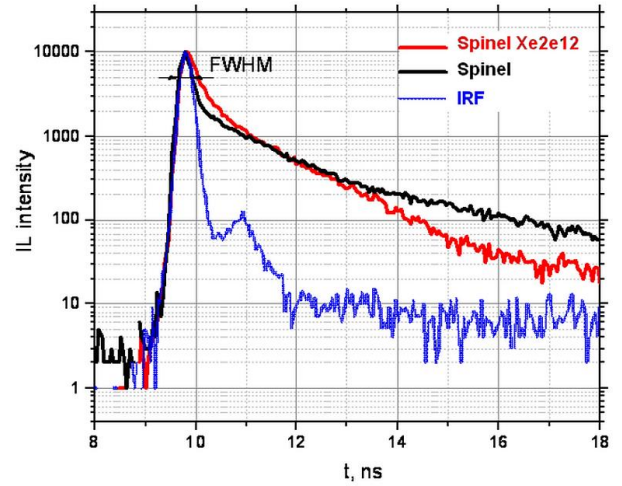


Figure 9. The time resolution function and luminescence decay curves of the initial and irradiated spinel. Measurements during irradiation with xenon ions (156 MeV). Ion flux density equals $10^6 \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$. FWHM = 250 ps

Figure 9 shows the time resolution function (IRF) measured on SiO_2 single crystals with a known decay time of excited states of less than 100 ps [21]. As can be seen, the full width at half maximum (FWHM), which is the instrumental resolution of the setup, is 250 ps, which allows us to study the decay kinetics of ionoluminescence starting from the subnanosecond range. The figure also shows the decay curves of luminescence stimulated by 156 MeV xenon ions obtained on the initial spinel crystals and samples pre-irradiated to a fluence of $2 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ as an example. The data illustrate the effect of radiation damage created by high-energy xenon ions on the kinetics of radiative recombination of excited states in the ion trajectory region.

CONCLUSION

As a result, a device for fast interruption of ion flows on DC-60 and IC-100 cyclotrons with the same structure of axial injection of ion flow from ECR source into the working chamber of the accelerator has been developed and manufactured. During test experiments, the possibi-

lity of designing the chopper for obtaining sparse ion beams with different bunch filling factors, down to a single bunch, has been demonstrated. A new design of the start signal detector has been developed for studying the kinetics of luminescence generated by high-energy ions, based on the use of electron emission directly from the surface of the sample under study and providing a time resolution of at least 250 picoseconds. The presented methodological developments significantly expand the possibilities of studying the optical properties of irradiated solids at early stages of defect structure formation.

Acknowledgements

This research was funded by the Committee of Science of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (Grant No. AP14973020).

REFERENCES

1. Crespillo M. L., Graham J. T., Zhang Y., Weber W. J. In-situ luminescence monitoring of ion-induced damage evolution in SiO₂ and Al₂O₃ // *Journal of Luminescence*. – 2016. – Vol. 172. – P. 208–218.
2. Calvo Del Castillo H., Ruvalcaba J. L., Bettinelli M., Speghini A., Barboza Flores M., Calderón T., Jaque D., García Solé J. Ionoluminescence of trivalent rare-earth-doped strontium barium niobate // *Journal of Luminescence*. – 2008. – Vol. 128, No. 5–6. – P. 735–737.
3. Townsend P. D. Variations on the use of ion beam luminescence // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. – 2012. – Vol. 286. – P. 35–39.
4. Seitbayev A., Skuratov V. A., Dauletbekova A., Teterev Yu. G., Krylov A. N., Mamatova M., Koloberdin M., Zdorovets M. Time-resolved high energy ionoluminescence of Al₂O₃ // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. – 2021. – Vol. 500–501. – P. 46–51.
5. Skuratov V. A., Gun K. J., Stano J., Zagorski D. L. In situ luminescence as monitor of radiation damage under swift heavy ion irradiation // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. – 2006. – Vol. 245, No. 1. – P. 194–200.
6. Zdorovets M., Ivanov I., Koloberdin M., Kozin S., Alexandrenko V., Sambaev E., Kurakhmedov A., Ryskulov A. Accelerator complex based on DC-60 cyclotron. // *Proceedings of 24th Russian Particle Accelerator Conference (Obninsk, Russia, 6-10 october, 2014)*. Geneva: JACoW Publishing, 2014. – P. 287–289.
7. Moscatello M., Anger P., Berthe C., Bertrand P., Bru B., David L., Giacomo M. di, Jamet Ch., Ozille M., Pellemoine F., Petit E., Savalle A., Vignet J. Recent developments for high intensity beams at GANIL // *Nukleonika*. – 2003. – Vol. 48 (suppl. 2). – P. S155–S158.
8. Araujo Martinez A. C., Agustsson R., Chen Y.-C., Kutsaev S., Plastun A., Rao X. Electromagnetic Design of a Compact RF Chopper for Heavy-Ion Beam Separation at FRIB // *Proceedings of the 5th North American Particle Accelerator Conference NAPAC2022 (Albuquerque, NM, USA, 07-12 August 2022)*. Geneva: JACoW Publishing, 2022. – P. 732–735.
9. Poirier F., Blain G., Bulteau-Harel F., Chiavassa S., Delpon G., Durand T., Fattahi M., Goiziou X., Haddad F., Koumeir C., Sengar A., Trichet H., Vandenborre J. The Injection and Chopper-Based System at Arronax C70XP Cyclotron // *Proceedings of the 22nd International Conference on Cyclotrons and their Applications (Cape Town, South Africa, 23-27 September 2019)*. – Geneva: JACoW Publishing, 2020. – P. 159–161.
10. Shor A., Vartsky D., Dangendorf V., Bar D., Aliz Y. B., Berkovits D., Brandis M., Goldberg M. B., Grin A., Mardor I., Mor I., Weissman L. Fast beam chopper at SARAF accelerator via RF deflector before RFQ // *J. Inst.* – 2012. – Vol. 7, No. 06. – P. C06003–C06003.
11. Bachiller-Perea D., Jiménez-Rey D., Muñoz-Martín A., Agulló-López F. Exciton mechanisms and modeling of the ionoluminescence in silica // *J. Phys. D: Appl. Phys.* – 2016. – Vol. 49, No. 8. – P. 085501.
12. Kimura K., Sharma S., Popov A. Fast electron-hole plasma luminescence from track-cores in heavy-ion irradiated wide-band-gap crystals // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. – 2002. – Vol. 191, No. 1–4. – P. 48–53.
13. Kimura K. Ultra-fast luminescence in heavy-ion track-cores in insulators: Electron-hole plasma // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. – 2003. – Vol. 212. – P. 123–134.
14. Gulley M. S. Tuning the beam: a physics perspective on beam diagnostic instrumentation // *Proceedings of 14th Beam Instrumentation Workshop (BIW10) (Santa Fe, New Mexico, US, 2010)*. – P. 491–497.
15. Bolzon B., Akagi T., Beauvais P.-Y., Cara P., Carmona J. M., Chauvin N., Chel S., Dzitko H., Gobin R., Harraut F., Heidinger R., Ichimiya R., Ihara A., Jimenez D., Kasugai A., Kitano T., Knaster J., Komata M., Kondo K., Marqueta A., Nishiyama K., Okumura Y., Podadera I., Pruneri G., Sakamoto K., Scantamburlo F., Senée F., Shinya T., Sugimoto M., Varela R. A. Beam diagnostics of an ECR ion source on LIPAc injector for prototype IFMIF beam accelerator // *Fusion Engineering and Design*. – 2018. – Vol. 136. – P. 1300–1305.
16. Гикал Б.Н., Гульбекян Г.Г., Иванов Г.Н., Ивонова И.Б., Казаринов Н.Ю., Казача В.И., Калагин И.В., Колесов И.В., Лебедев Н.И., Мельников В.Н., Серобаба А.П., Фатеев А.А. Система транспортировки пучков тяжелых ионов, выведенных из циклотрона ДЦ-60 // *Сообщение Объединенного института ядерных исследований P9.-2006-37*. – 2006. – С. 1–12. [Gikal B.N., Gul'bekyan G.G., Ivanov G.N., Ivonova I.B., Kazarinov N.Yu., Kazacha V.I., Kalagin I.V., Kolesov I.V., Lebedev N.I., Mel'nikov V.N., Serobaba A.P., Fateev A.A. Sistema transportirovki puchkov tyazhelykh ionov, vyvedennykh iz tsiklotrona DTs-60 // *Soobshchenie Ob'edinnennogo instituta yadernykh issledovaniy R9.-2006-37*. – 2006. – P. 1–12. (In Russ.)]
17. Gikal B. N., Dmitriev S. N., Gul'bekyan G. G., Apel' P. Yu., Bashevoi V. V., Bogomolov S. L., Borisov O. N., Buzmakov V. A., Ivanenko I. A., Ivanov O. M., Kazarinov N. Yu., Kolesov I. V., Mironov V. I., Papash A. I., Pashchenko S. V., Skuratov V. A., Tikhomirov A. V., Khabarov M. V., Cherevatenko A. P., Yazvitskii N. Yu. IC-100 accelerator complex for scientific and applied

- research // Phys. Part. Nuclei Lett. – 2008. – Vol. 5, No. 1. – P. 33–48.
18. A Low-Side RF MOSFET Driver IXRFD631. Available at: https://ixysrf.com/wp-content/uploads/2017/09/IXRFD631_Datasheet_RevA-1.pdf (accessed 9 June 2024).
19. DE275-102N06A RF Power MOSFET. Available at: <https://www.alldatasheet.com/datasheet-pdf/pdf/314497/IXYS/DE275-102N06A.html> (accessed 9 June 2024).
20. Koshimizu M., Kimura K., Fujimoto Y., Asai K. Fast luminescence in vacuum ultraviolet region in heavy-ion-irradiated α - Al_2O_3 // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. – 2015. – Vol. 365. – P. 540–543.
21. Weber M. J., Derenzo S. E., Moses W. W. Measurements of ultrafast scintillation rise times: evidence of energy transfer mechanisms // Journal of Luminescence. – 2000. – Vol. 87–89. – P. 830–832.

DC-60 ЖӘНЕ IC-100 ЦИКЛОТРОНДАРЫНДАҒЫ ҮДЕТІЛГЕН ИОН АҒЫНЫН ТЕЗ ҮЗУГЕ АРНАЛҒАН ҚҰРЫЛҒЫ

**М. В. Колобердин^{1,2*}, И. А. Иванов^{1,2}, Л. Павлов³, А. Исатов³, С. Митрофанов³,
В. А. Скуратов³, М. В. Здоровец^{1,2}, Б. С. Аманжулов^{1,2}**

¹ ҚР Атом энергиясы жөніндегі агенттігінің «Ядролық физика институты» РМК, Алматы, Қазақстан

² КЕАҚ «Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті», Астана, Қазақстан

³ Біріккен ядролық зерттеулер институты, Дубна, Ресей

* Байланыс үшін E-mail: koloberdin@inp.kz

Сәуленген қатты денелердің оптикалық қасиеттерін ақаулық құрылымның қалыптасуының бастапқы кезеңдерінде зерттеу үшін тіркелетін ионолюминесценцияның уақыт бойынша айыруды жақсарту және нысанамен әрекеттесетін бөлшектерді энергияның азырақ шашылымымен тіркеу қажет. Мақалада иондық шоқты үдеткіштің магниттік-резонансты жүйесіне айдау алдында үдеткіштің аксиалды инжекциясының арнасында орналастырылған ауытқытушы пластиналарға негізделген «чоппер» деп аталатын жылдам шоқты үзгіштің әзірленген жүйесі сипатталған. Чоппер ион көзінен алынған және үдеткішке айдалатын аксиалды инжекция арнасындағы иондардың тұрақты ағынына әсер етеді және оны үдеткіштің шығуында қажетті жиынтық («банч») санын алу үшін қажетті жиілікте ауытқытады. Чоппер резонанстық жүйелері 11 МГц-тен 22 МГц-ке дейінгі жиілік диапазонында жұмыс істейтін DC-60 және IC-100 үдеткіш кешендерінде әртүрлі уақыт параметрлері бар зарядталған бөлшектер шоғын алуға мүмкіндік береді, ал иондарды үдету кезінде ол үдеткіштің шығуында ұзақтығы шамамен ~2 нс және ~5 нс-қа тең және қайталану периоды ~90...45 нс-қа тең бөлшектер жиынтықтарына топтастырылған ағындарды жасайды. Бұл чопперде жоғары жылдамдықты ажыратып-қосқыш пайдалану арқылы ауытқытушы пластиналарға жоғары кернеу жеткізіліп, онда ион ағыны үдеткішке айдалудан қажетті сәтте ауытқиды, осылайша жиынтықтар санын, сәйкесінше ион ағынын 100%-дан 1%-ға дейін, бір жиынтыққа дейін тиімді сиретуді қамтамасыз етеді.

Түйін сөздер: циклотрон; чоппер; үзгіш; жоғарывольтті ажыратып-қосқыш; ионолюминесценция.

УСТРОЙСТВО БЫСТРОГО ПРЕРЫВАНИЯ ПОТОКА УСКОРЕННЫХ ИОНОВ НА ЦИКЛОТРОНАХ DC-60 И IC-100

**М. В. Колобердин^{1,2*}, И. А. Иванов^{1,2}, Л. Павлов³, А. Исатов³, С. Митрофанов³,
В. А. Скуратов³, М. В. Здоровец^{1,2}, Б. С. Аманжулов^{1,2}**

¹ РГП «Институт ядерной физики» Агентства РК по атомной энергии, Алматы, Казахстан

² НАО «Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилёва», Астана, Казахстан

³ Объединённый институт ядерных исследований, Дубна, Россия

* E-mail для контактов: koloberdin@inp.kz

Для исследования оптических свойств облученных твердых тел на ранних стадиях образования дефектной структуры возникает необходимость улучшения временного разрешения регистрируемой ионолюминесценции и регистрации взаимодействующих с образцом частиц с меньшим разбросом энергий. В статье описывается разработанная система быстрого прерывателя пучка, именуемая «чоппер», в основе которой лежат отклоняющие пластины, размещаемые в канале аксиальной инжекции ускорителя, непосредственно перед инжекцией ионного пучка в магнитно-резонансную систему ускорителя. Чоппер влияет на постоянный поток ионов в аксиальной инжекции, получаемый из источника ионов и инжектируемый в ускоритель, и отклоняет его с частотой, необходимой для получения необходимого количества сгустков («банчей») на выходе из ускорителя. Чоппер позволяет получать пучок заряженных частиц с различными временными параметрами на ускорительных комплексах DC-60 и IC-100, резонансные системы которых работают в диапазоне частот от 11 МГц до 22 МГц, и при ускорении ионов создает на выходе ускорителя потоки частиц, сгруппированные в сгустки длительностью около $\sim 2 \dots 5$ нс и с периодом повтора $\sim 90 \dots 45$ нс. В данном чоппере используется быстродействующий переключатель высокого напряжения, подаваемого на отклоняющие пластины, на которых поток ионов отклоняется в нужный момент от инжекции в ускоритель, тем самым обеспечивая эффективное разрежение количества сгустков, а соответственно и потока ионов от 100% до 1%, вплоть до одиночных сгустков.

Ключевые слова: циклотрон; чоппер; прерыватель; высоковольтный переключатель; ионолюминесценция.

<https://doi.org/10.52676/1729-7885-2025-4-29-40>

УДК 539.213.26

РОЛЬ РАЗМЕРНЫХ ЭФФЕКТОВ И ФАЗОВЫХ ПОЛИМОРФНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В КОМПОЗИТНЫХ КЕРАМИКАХ НА ТЕПЛОИЗОЛЯЦИОННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ И СОПРОТИВЛЯЕМОСТЬ К ВНЕШНИМ ВОЗДЕЙСТВИЯМ

И. Е. Кенжина^{1,2}, А. Л. Козловский^{1,2*}, Ш. Хаметов³, П. Блынский^{1,4}

¹ Satbayev University, Алматы, Казахстан

² РГП «Институт ядерной физики» Агентства РК по атомной энергии, Алматы, Казахстан

³ НАО «Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева», Астана, Казахстан

⁴ Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия

* E-mail для контактов: kozlovskiy.a@inp.kz

В работе рассмотрена роль изменений морфологии зерен, связанных с процессами фазовых полиморфных превращений в ZrO_2 при варьировании концентрации стабилизирующего допанта Y_2O_3 на изменение теплофизических параметров, а также устойчивости к внешним воздействиям, вызванным резкими изменениями температур, механических нагрузок, длительным термическим нагревом. Оценка фазовых трансформаций, вызванных изменением концентрации стабилизирующего допанта Y_2O_3 показала, что при малых концентрациях доминирующую роль в фазовых изменениях играют процессы превращений типа $m - ZrO_2 \rightarrow t - Zr(Y)O_2$, в то время как при концентрациях допанта выше 0,10 М доминируют процессы с образованием фазы пироклора $Y_2Zr_2O_7$, процессы фазообразования которой приводят к укрупнению зерен при спекании. Согласно оценке теплоизоляционных характеристик установлено, что доминирование в составе композитных керамик фазы пироклора $Y_2Zr_2O_7$ приводит к снижению теплопроводности керамик, а также увеличению эффективности теплоизоляции, как в случае низких температур, так и при длительном воздействии высокотемпературного нагрева. Оценка устойчивости керамик к процессам термошоковых воздействий, связанных с резким изменением температуры нагрева – охлаждения, показала, что композитные керамики с доминирующей в составе фазой пироклора обладают большей устойчивостью к температурным перепадам, за счет сохранения стабильности к внешним воздействиям и низкой теплопроводности.

Ключевые слова: композитные керамики; термошоковое воздействие; теплоизоляционные материалы; полиморфные мартенситные трансформации; прочностные характеристики.

ВВЕДЕНИЕ

Повышение рабочих температур реакторов, а также газовых турбин, требует сохранения стабильности металлических конструкций при длительном термическом воздействии (при температурах выше 1000 °С), а также снижению процессов высокотемпературного окисления, связанного с проникновением кислорода в приповерхностные слои, с последующей деструкцией и охрупчиванием, сопровождающимся отслаиванием приповерхностных слоев [1–3]. При этом, повышение сопротивляемости стальных конструкций к высокотемпературной деградации, связанных с модификацией стали за счет добавления стабилизаторов, сдерживающих процессы окисления, является весьма дорогостоящим, и требует проведения большого количества научных работ в данном направлении [2, 4]. Одним из способов решения проблемы повышения устойчивости стальных конструкций к процессам высокотемпературной деградации является нанесение на них так называемых «жертвенных керамических покрытий», выступающих в роли барьерных покрытий, сдерживающих процессы высокотемпературного окисления за счет исключения прямого контакта кислорода и продуктов горения с поверхностью стали, а также снижению температурного воздействия за счет термоизоляции [5–7].

Большой интерес в области высокопрочных жаропрочных композитных керамик направлен на возможность применения их в качестве термобарьерных защитных покрытий, способных эксплуатироваться в экстремальных условиях, связанных с воздействием высоких температур (порядка 1000–1500 °С) в течение длительного времени, а также возможности сохранения их прочностных свойств при термошоковых воздействиях в случае резких перепадов температур [8, 9]. Одним из ключевых требований к материалам, рассматривающихся в качестве термобарьерных защитных покрытий, является их низкие показатели теплопроводности, коэффициента термического расширения, а также стабильности кристаллической структуры к процессам деструкции, вызванных окислением при высоких температурах [10, 11]. Также немаловажную роль в определении потенциала использования композитных керамик в качестве термобарьерных материалов является возможность сохранения стабильности прочностных характеристик, а также адгезионной прочности на разрушение, характеризующей сохранение поверхности покрытий к разрушению при внешних механических воздействиях [12–14].

Основная цель данного исследования заключается в определении кинетики изменения фазового состава и морфологических особенностей $\text{Al}_2\text{O}_3\text{--ZrO}_2$ керамик при добавлении в состав стабилизирующего допанта Y_2O_3 на упрочнение и повышение устойчивости к термическим воздействиям, а также изменению теплоизоляционных характеристик, определяющих перспективность использования подобных композитных керамик в качестве термобарьерных материалов для защиты от высокотемпературной коррозии. Добавление стабилизирующего допанта в состав керамик при вариации его концентрации (весового объема) способствует инициированию процессов полиморфных трансформаций в диоксиде циркония, структурные изменения в котором, как правило, сопровождаются процессами рекристаллизации зерен, приводящим к изменению их размеров, а также формированию керамик по типу « Al_2O_3 матрица с включениями в виде ZrO_2 зерен».

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

В качестве метода получения композитных $\text{Al}_2\text{O}_3\text{--ZrO}_2$ керамик стабилизированных Y_2O_3 был применен метод твердофазного механохимического синтеза, совмещенный с термическим отжигом образцов после перемалывания. Выбор компонент для получения композитных керамик осуществлялся на следующих факторах, связанных с теплофизическими и прочностными характеристиками исходных компонент. Оксид алюминия был выбран за счет высокой температуры плавления (более 2000°C), устойчивостью к процессам окисления при высоких температурах, прочностными параметрами и устойчивостью к термическому расширению. При этом теплопроводность Al_2O_3 значительно выше, чем у ZrO_2 , что требует необходимости ее снижения в случае использования данного типа материалов в качестве термобарьерных защитных покрытий. Выбор ZrO_2 в качестве компонента композитной керамики обусловлен низкими показателями теплопроводности (менее $2 \text{ Вт/(м}\cdot\text{К)}$), высокими прочностными характеристиками и трещиностойкостью, показатели которой зависят от полиморфной фазы ZrO_2 , изменение которой можно достичь путем стабилизации ее различными компонентами, в том числе Y_2O_3 добавление которого приводит к инициализации процесса замещения типа $\text{Zr}^{4+} \rightarrow \text{Y}^{3+}$, которые сопровождаются образованием кислородных вакансий, формирование которых обусловлено необходимостью соблюдения электронной нейтральности в кристаллической решетки. Возможность стабилизации ZrO_2 зерен допантом Y_2O_3 позволяет повысить сопротивляемость керамик к внешним воздействиям, а также усилить сопротивляемость керамик к термическому расширению за счет изменения как теплофизических параметров стабилизированного ZrO_2 , так и исключением эффектов полиморфных трансформаций, которые сопровождаются увеличением объема и образованием микропор в структуре. При этом формирование мелкодисперсных стабилизированных ZrO_2 зерен в межзерен-

ном пространстве, образующемся между крупными Al_2O_3 зернами, приводит к повышению устойчивости к растрескиванию за счет создания барьеров в виде границ зерен при плотной упаковке мелкодисперсных зерен, которые также сдерживают рост Al_2O_3 зерен при термическом спекании.

Синтез осуществлялся путем механического измельчения исходных порошков в заданном стехиометрическом соотношении, варьирование которого осуществлялось за счет изменения весового вклада стабилизирующего допанта Y_2O_3 в диапазоне от 0,01 до 0,20 М. При этом компоненты оксида алюминия и диоксида циркония брались в равном весовом соотношении друг к другу. Навеска образцов осуществлялась с использованием лабораторных весов Radwag (Radwag Wagi Elektroniczne, Радом, Польша), точность навесок составляла не менее 0,001 г. Общий вес исходных компонент для перемалывания составлял порядка 20 г. Механохимический синтез осуществлялся путем перемалывания исходных компонент композитных керамик в заданном стехиометрическом соотношении в планетарной мельнице PULVERISETTE 6 (Fritsch, Берлин, Германия), при скорости помола 250 об/мин в течение 30 минут. Перемалывание осуществлялось в соотношении 1:2 компонент порошков к мелющим телам в виде шариков диаметром 10 мм. Общий объем стакана составлял 80 мл. После перемалывания полученные порошки подвергались термическому отжигу в муфельной печи Nabertherm LE 4/11/R6 (Nabertherm, Лилиенталь, Германия) при температуре 1500°C в течение 5 часов с последующим остыванием порошков в камере печи вместе с печью в течение суток до полного остывания печи.

Анализ морфологических особенностей исследуемых керамик, а также влияния вариации соотношения компонент на изменение морфологических особенностей полученных образцов был проведен с применением метода растровой электронной микроскопии. Реализация данного метода была осуществлена на растровом электронном микроскопе PhenomTM ProX (Thermo Fisher Scientific, Эйндховен, Нидерланды). Снимки были получены при одинаковом увеличении, выбор которого основывался на возможностях визуализации морфологических особенностей и формы зерен с максимально возможной детализацией. При обработке снимков был использован метод энергодисперсионного анализа, который позволил определить различие в составе исследуемых керамик при оценке светлополюсных и темнопольных зерен на представленных изображениях. Анализ проводился с учетом априорной информации о том, что более легкие элементы и соединения при получении растровых электронных изображений имеют больший контраст и представлены темнопольными областями на снимках.

Изучение кинетики изменений фазового состава исследуемых керамик осуществлялось путем сравнительного анализа рентгеновских дифрактограмм полученных образцов с эталонными значениями из базы данных, что в свою очередь позволило определить не

только фазовый состав каждого из исследуемых образцов, но и установить влияние вариации соотношения компонент в составе керамик на фазовые полиморфные превращения. Дифрактограммы были получены на рентгеновском порошковом дифрактометре D8 ADVANCE ECO (Bruker, Карлсруэ, Германия). Съемка дифрактограмм была выполнена в геометрии Брегг – Брентано, в угловом диапазоне $2\theta = 20\text{--}90^\circ$, с шагом $0,05^\circ$, время набора в точке составило 1 с. Дифрактограммы были обработаны и проанализированы в программном коде DiffractionEVA v.4.2.

Анализ фазового состава проводился с использованием метода сравнения положения дифракционных линий с карточными значениями, а оценка весовых вкладов использовалась для определения соотношения фаз в составе керамик. Определение весовых вкладов проводилось с применением стандартного метода, в основе которого лежит использование оценки весовых вкладов площадей всех дифракционных рефлексов представляющих данную фазу к общей площади дифрактограммы. Также при уточнении весового вклада каждой фазы использовались величины корундовых чисел, определенных из базы данных PDF-2.

Эксперименты на устойчивость к термошоковым воздействиям проводились путем быстрого нагрева образцов до температур 1500°C , выдержке их при данной температуре в течение 30 минут с последующим резким извлечением из камеры печи на воздух, что приводит к резкому перепаду температур, имитирующему термошоковое воздействие, приводящее к дестабилизации кристаллической структуры и ее окислению за счет контакта разогретой поверхности образцов с воздухом. Оценка устойчивости керамик к подобным явлениям осуществлялась путем измерений значений твердости и адгезионной прочности на отрыв и последующего сравнения полученных данных с исходными значениями, полученными для исследуемых образцов. Количество испытаний на термошоковое воздействие осуществлялось путем циклических испытаний, измерение твердости и адгезионной прочности проводились после 3, 5 и 7 и 10 циклов.

Тесты на определение адгезионной прочности проводились с использованием испытательной машины Unitest framework SKU UT-750 (Unitest, США). Величина адгезионной прочности оценивалась методом царапания путем воздействия на индентор переменной нагрузки приводящей к частичному отрыву приповерхностного слоя от основного материала.

Тесты на определение твердости образцов проводились на микротвердометре Duroline M1 (Metkon, Бурса, Турция). В качестве индентора использовалась пирамида Виккерса, нагрузка на индентор составляла 100 Н, время воздействия индентора на поверхность керамики составляло порядка 15 с, с последующей идентификацией отпечатка индентора на образце и определения значений твердости.

Определение возможности использования керамик в качестве термобарьерных материалов было проведе-

но путем проведения экспериментов направленных на выявление сдерживания теплового воздействия при длительном термическом нагреве. Эксперименты проводились путем размещения образцов керамик на нагревательных элементах с контролем температур двух сторон образца: лицевой стороны, подвергающейся непосредственному нагреву за счет прямого контакта с нагревателем, и обратной стороны, температура которой свидетельствует о том, насколько прогрелся образец за прошедшее время. Разница температур лицевой и обратной стороны (ΔT) позволила оценить теплоизоляционные свойства керамик при длительном термическом воздействии. Эксперименты проводились в 4 температурных режимах: при температурах 500, 700, 1000 и 1500°C , время испытаний составляло порядка 100 часов, контроль проводился с периодическим замером ΔT .

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рисунке 1 приведены детализированные изображения морфологии поверхности полученных $\text{Al}_2\text{O}_3\text{--ZrO}_2$ керамик в зависимости от добавления в состав стабилизирующего допанта Y_2O_3 в случае вариации его концентрации при перемалывании и последующем термическом отжиге. Согласно ранее проведенным исследованиям, было установлено, что в силу нерастворимости оксида алюминия в диоксиде циркония, механохимическое перемалывание данных оксидов и последующий термический отжиг полученной смеси приводит к формированию композита по типу « Al_2O_3 матрица с включениями в виде ZrO_2 зерен» [15, 16]. При этом на размеры ZrO_2 зерен оказывают влияние, как условия термической обработки, так и вариация соотношения компонент в составе композитной керамики. В случае исходных нестабилизированных $\text{Al}_2\text{O}_3\text{--ZrO}_2$ керамик, согласно представленным изображениям на рисунке 1а отчетливо видно, что керамики представляют собой матрицу из крупных темнопольных зерен с включениями в них более мелких светлопольных зерен, а также заполненном межзеренном пространстве более крупными светлопольными зернами. Согласно данным энергодисперсионного анализа установлено, что темнопольные включения зерна соответствуют оксиду алюминия, а светлопольные частицы соответствуют диоксиду циркония, что в свою очередь имеет хорошее согласие с результатами ранее проведенных исследований, указывающих на формирование подобного типа композитов при термическом спекании $\text{Al}_2\text{O}_3\text{--ZrO}_2$. При этом отчетливо видно, что формирование ZrO_2 зерен происходит в межзеренном пространстве с заполнением его и образованием тройных–четверных стыков зерен, а также образованием мелкодисперсных включений в структуре крупных Al_2O_3 зерен матрицы. При этом в составе керамик присутствует достаточное количество пор, обусловленных процессами спекания, а также деформационными искажениями при кристаллизации ZrO_2 зерен, формирование которых происходит при термическом отжиге.

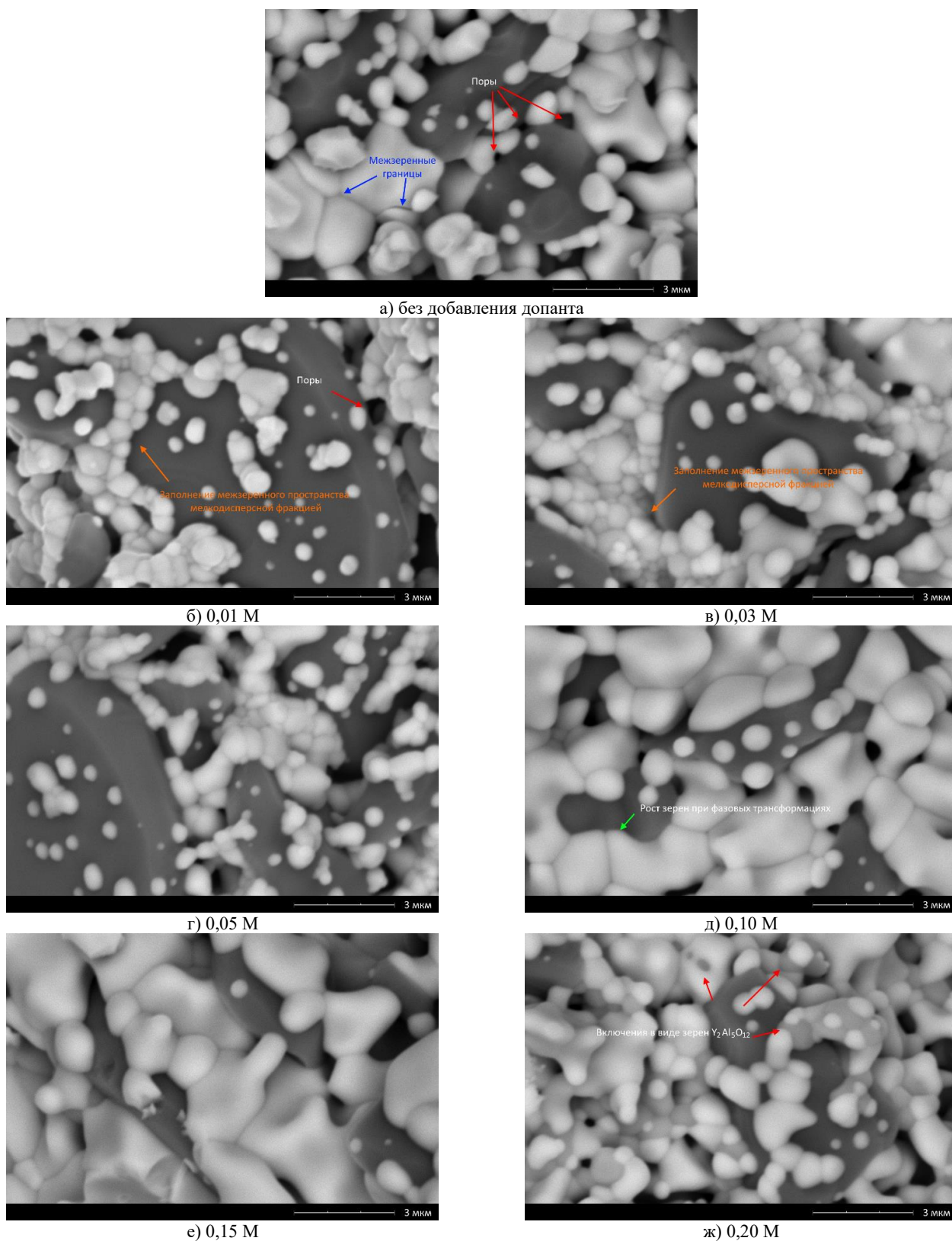


Рисунок 1. Детализированные изображения поверхности полученных керамик при вариации концентрации стабилизирующего допанта в составе

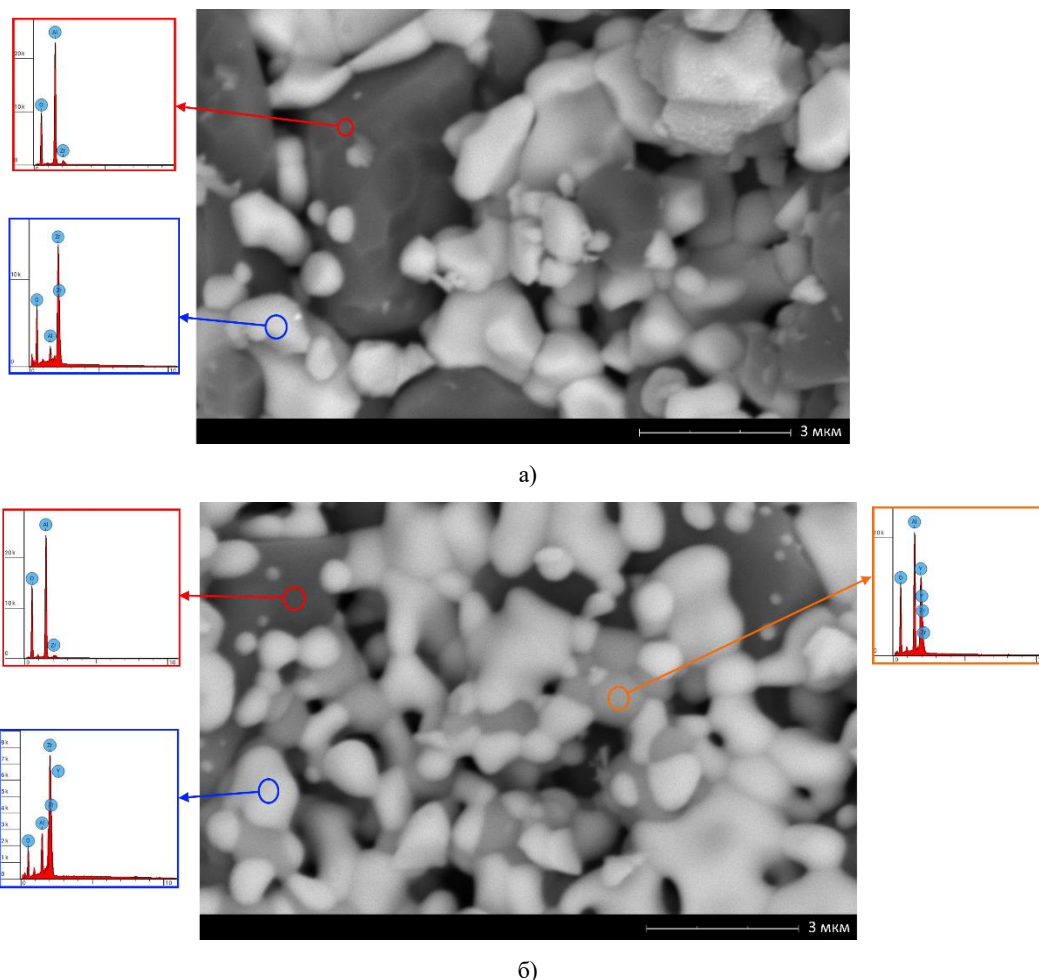


Рисунок 2. Результаты оценки элементного состава зерен в составе керамик, отражающие формирование зерен с различным содержанием элементов (на вставках приведены результаты элементного анализа исследуемых участков, отражающих различия в элементном составе частиц, имеющих явно отличную друг от друга форму): а) в случае исходных компонент; б) в случае образца с концентрацией стабилизирующего допанта Y_2O_3 равной 0,20 М

На рисунке 2 приведены результаты сравнительного анализа двух типов керамик: без добавления стабилизирующего допанта и с добавлением в состав Y_2O_3 с концентрацией равной 0,20 М, отражающие элементный состав зерен, имеющих различия при их визуализации с применением метода растровой электронной микроскопии. Данные приведены с целью сравнения изменений, вызванных процессами фазовых трансформаций, связанных с образованием зерен ZrO_2 , а также отличных от основных наблюдаемых зерен при большой концентрации допанта Y_2O_3 (равной 0,20 М), появление которых обусловлено процессами взаимодействия между оксидом иттрия и алюминия, в случае большой концентрации оксида иттрия, и как следствие, кислородных вакансий, возникновение которых связано с процессами замещения $Zr^{4+} \rightarrow Y^{3+}$, сопровождающимся образованием кислородных вакансий (V_O). Энергодисперсионный анализ темнопольных зерен, выполненный с целью определения состава частиц показал, что данные ча-

стицы состоят из алюминия и кислорода, соотношение которых в целом соответствует стехиометрии соединению Al_2O_3 . При этом малый пик на вставке энергодисперсионного спектра, характерный для циркония может быть обусловлен условиями съемки спектров, связанными с размерами измеряемой области в глубину (глубина измерений составляет порядка 1,5–5 мкм при ускоряющем напряжении 15 кВ).

На рисунке 3 приведены результаты рентгенофазового анализа исследуемых Al_2O_3 – ZrO_2 керамик в зависимости от вариации стабилизирующего допанта Y_2O_3 в составе, изменение которого как было установлено методами растровой электронной микроскопии и энергодисперсионного анализа приводит к изменениям морфологических особенностей, а также образованию включений, имеющих соотношение элементов близкое к образованию иттрий-алюминиевого граната ($Y_2Al_5O_{12}$), появление которого обусловлено процессами взаимодействия оксидов иттрия и алюминия.

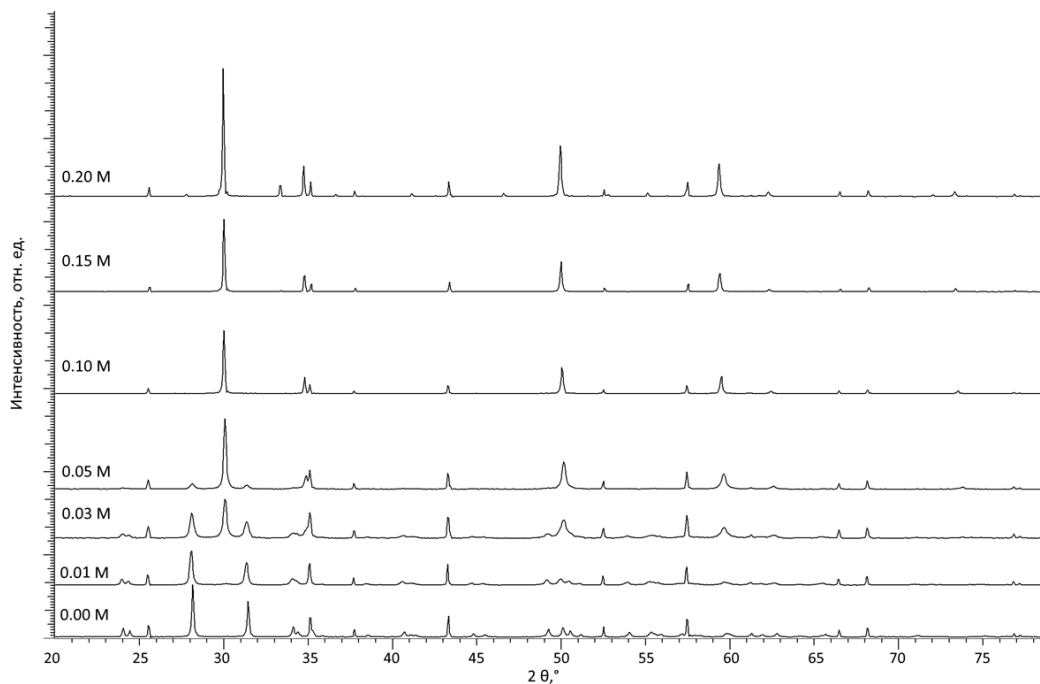


Рисунок 3. Результаты рентгенофазового анализа исследуемых образцов $\text{Al}_2\text{O}_3\text{--ZrO}_2$ керамик, стабилизированных Y_2O_3 с различной концентрацией, отражающие изменения фазового состава и структурных особенностей образцов

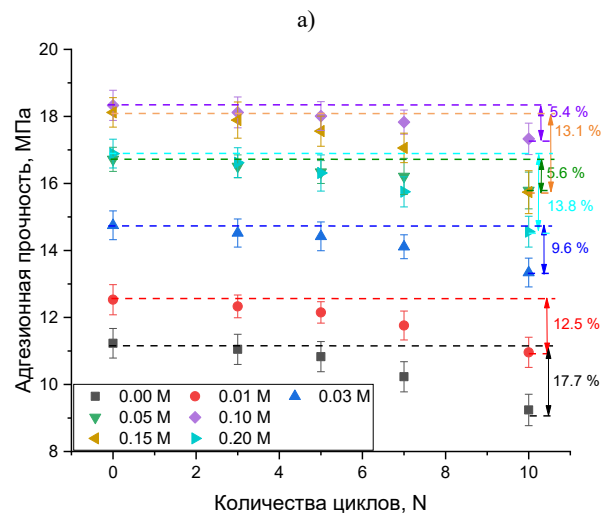
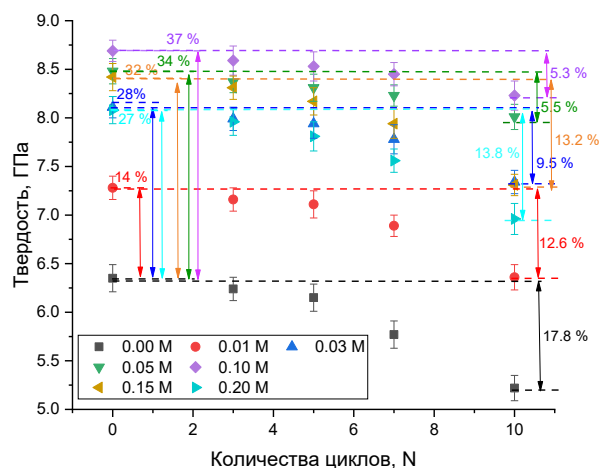
Согласно результатам рентгенофазового анализа было установлено, что добавление в состав $\text{Al}_2\text{O}_3\text{--ZrO}_2$ керамик стабилизирующего допанта Y_2O_3 при малых концентрациях (0,01–0,05 М) приводит к инициализации полиморфных мартенситных превращений типа $m\text{--ZrO}_2 \rightarrow t\text{--Zr(Y)O}_2$, с последующим увеличением весовой доли тетрагональной фазы в составе керамик. При этом формирование фазы тетрагональной Zr(Y)O_2 сопровождается процессами замещения $\text{Zr}^{4+} \rightarrow \text{Y}^{3+}$, что в свою очередь сопровождается увеличением параметров кристаллической решетки, обусловленному различиями в ионных радиусах, ввиду того, что ионный радиус Y^{3+} составляет 1,02 Å, а ионный радиус Zr^{4+} составляет порядка 0,84 Å [17, 18]. Таким образом рост параметров кристаллической решетки, установленный при оценке формы и положения дифракционных рефлексов в область малых углов, свидетельствующее об увеличении межплоскостных расстояний, а также увеличению параметров кристаллической решетки. При концентрациях допанта Y_2O_3 выше 0,05 М в составе керамик наблюдается формирование кубической фазы $\text{Y}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$ со структурой пироклора, образование которой свидетельствует о процессах полиморфных трансформаций типа $m\text{--ZrO}_2 / t\text{--Zr(Y)O}_2 \rightarrow c\text{--Y}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$ (пироклор). При этом увеличение концентрации допанта Y_2O_3 выше 0,10 М к полному вытеснению из структуры включений моноклинной и тетрагональной фаз, с последующим доминированием фазы пироклора. В случае концентрации допанта Y_2O_3 равной 0,20 М, в составе керамик помимо фазы пироклора наблюдается формирование кубической фазы

$\text{Y}_2\text{Al}_5\text{O}_{12}$, соответствующей включениям иттрий-алюминиевого граната, формирование которого как было установлено при анализе данных морфологических особенностей происходит в межзеренном пространстве, с последующим формированием дополнительных деформационных искажений, воздействие которых может привести к снижению прочностных свойств керамик.

На рисунке 4а приведены результаты оценки изменений значений твердости керамик в зависимости от количества циклов испытаний на термостойкость, включающих в себя нагрев образцов до 1500 °С и быстрого охлаждения путем извлечения образцов на воздух, что создает резкий градиент температур, провоцирующий процессы окисления приповерхностного слоя при контакте с атмосферой нагретой поверхности. Значения твердости, приведенные для нулевого цикла испытаний, отражают результаты влияния вариации фазового состава керамик и размерных эффектов, связанных с изменением соотношения компонент в составе керамик на эффективность упрочнения. Как видно из представленных данных, добавление в состав $\text{Al}_2\text{O}_3\text{--ZrO}_2$ керамик стабилизирующего допанта Y_2O_3 при концентрациях 0,01–0,05 М приводит к увеличению значений твердости с 6,35 ГПа до 7,3–8,5 ГПа, что свидетельствует об упрочнении от 14 до 33% в сравнении с нестабилизированными керамикami. При этом максимальное значение твердости 8,7 ГПа достигается при концентрации стабилизирующего допанта 0,10 М, при добавлении которого наблюдается полное вытеснение моноклинной фазы и доминированием в структуре фазы пироклора. При

этом, как видно из данных морфологических особенностей, представленных на рисунке 1, при данных концентрациях стабилизирующего допанта, приводит к формированию мелкодисперсной фракции в составе керамик, что способствует упрочнению за счет наличия межзеренных границ, большая плотность которых приводит к созданию дополнительных препятствий для микротрещин. В данном случае, изменение фазового состава керамик за счет вариации концентрации стабилизирующего допанта в составе, сопровождающееся уменьшением размеров зерен, а также формированием мелкодисперсной фракции, заполняющей межзеренное пространство, образующееся между зернами матрицы, приводит к увеличению сопротивляемости к внешним воздействиям при механических испытаниях. Однако, увеличение концентрации допанта выше 0,10 М, которое согласно данным исследований морфологических особенностей приводит к укрупнению зерен, за счет процессов спекания фазы пироклора, а также формированию включений в виде зерен $Y_2Al_5O_{12}$ приводит к незначительному снижению эффекта упрочнения до 27–30% по сравнению с исходными нестабилизированными образцами керамик, а сам эффект снижения составляет не более 3–5% по сравнению с данными, полученными для образцов с максимальными значениями твердости. Подобное снижение твердости образцов керамик в исходном состоянии объясняется эффектом укрупнения зерен, приводящим к снижению плотности дислокаций, а также формированием дополнительных включений в виде $Y_2Al_5O_{12}$, формирование которых приводит к деформационному искажению кристаллической структуры матрицы, что сказывается на устойчивости и сопротивляемости к внешним механическим воздействиям. Результаты тестовых испытаний на определение устойчивости к термошоковым воздействиям, показанные в виде зависимости изменений значений твердости после прохождения определенного количества циклов (см. данные на рисунке 4а) являются прямым подтверждением влияния размерных эффектов и фазовых трансформаций на изменение сопротивляемости к термошоковым воздействиям. При этом, как видно из представленных зависимостей, снижение твердости наблюдается после 3–5 циклов последовательного термошокового воздействия на образцы, в сами тренды изменений имеют явно нелинейный характер, свидетельствующий об ускорении процессов дестабилизации в зависимости от количества термоциклов. В случае исходных нестабилизированных керамик максимальное снижение твердости после 10 циклов циклических испытаний на термостойкость составляет порядка 18%, что превышает порог допустимого значения (10%) более чем в 1,5 раза и свидетельствует о деструктивном влиянии термошоковых воздействий на устойчивость к внешним воздействиям керамик. При этом изменение фазового состава керамик за счет добавления стабилизирующего до-

панта приводит к увеличению сопротивляемости к растрескиванию и сохранению твердости при большом количестве термошоковых воздействий. В случае керамик, в составе которых доминирует фаза пироклора $Y_2Zr_2O_7$, максимальное снижение твердости после 10 циклов испытания составляет менее 6%, что более чем в 2,5–2,7 раза меньше, чем аналогичные изменения, наблюдаемые для нестабилизированных керамик.



пунктирными линиями обозначена разница между начальными значениями и после 10 циклов испытаний на термостойкость в процентном отношении, отражающем степень деградации показателей в результате накопления термострессовых напряжений

Рисунок 4. Результаты оценки изменения: твердости образцов керамик в результате циклических испытаний на термостойкость при нагреве образцов до 1500 °С и быстрого охлаждения (а) и адгезионной прочности исследуемых керамик (б) в зависимости от количества циклов испытаний на термостойкость

Также следует отметить, что не смотря на то, что формирование включений в виде зерен $Y_2Al_5O_{12}$ в составе керамик при большой концентрации стабилизирующего допанта приводит к уменьшению твердо-

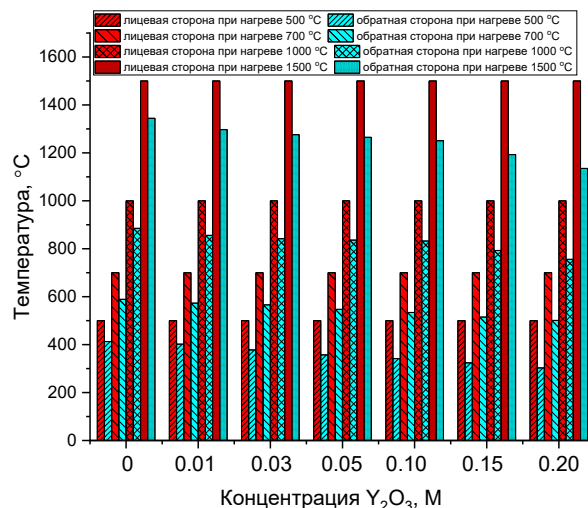
сти, показатели устойчивости к деградации при термошоковом воздействии меньше, чем полученные для нестабилизированных керамик. В данном случае, более высокие показатели устойчивости к термическому воздействию обусловлены структурными особенностями фазы пироклора, укрупнение зерен которой хоть и приводит к снижению значений твердости в исходном состоянии, сохраняет более высокие показатели сопротивляемости к высокотемпературной деградации за счет более плотной упаковки кристаллической структуры и более высоких показателей степени структурного упорядочения.

На рисунке 4б представлены результаты оценки изменений параметров адгезионной прочности керамик в зависимости от количества циклов испытаний на термостойкость, отражающие устойчивость поверхностного слоя к отрыву при накоплении стрессовых напряжений в структуре, вызванных термошоковым воздействием. Результаты были получены с целью оценки устойчивости приповерхностного слоя к отслаиванию при накоплении деформационных искажений и продуктов высокотемпературной коррозии в случае термошоковых испытаний. Общий тренд наблюдаемых изменений адгезионной прочности как в случае вариации концентрации стабилизирующего допанта, так и в случае увеличения количества циклов термошоковых воздействий, сравним с результатами изменения твердости, представленных на рисунке 4а. Подобное сходство изменений свидетельствует о прямой взаимосвязи между твердостью и устойчивостью к отслаиванию поврежденного слоя при термошоковом воздействии, а также, является подтверждением прямой роли изменений фазового состава и размерных эффектов на изменение прочностных свойств керамик и их сопротивляемость к внешним воздействиям, включая механическое воздействие и резкие перепады температур, возникающие при термострессовых воздействиях.

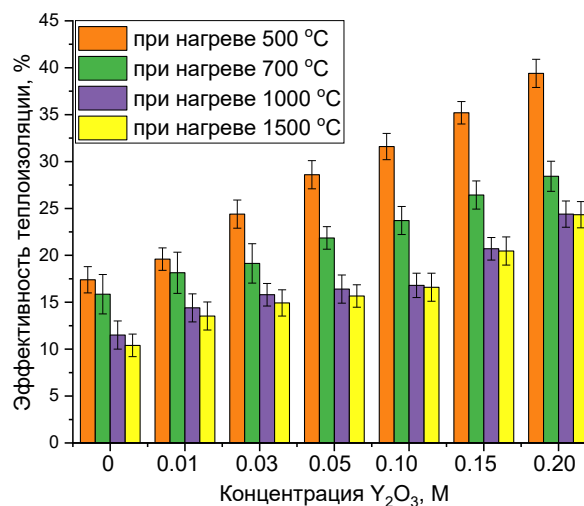
Согласно полученным данным, можно сделать вывод о том, что увеличение сопротивляемости к термострессовым воздействиям в данном случае обусловлено совокупностью факторов, вызванных вариацией соотношения компонент в составе керамик за счет добавления в них стабилизирующего допанта Y_2O_3 . При малых концентрациях стабилизирующего допанта, наблюдаемые изменения прочностных характеристик связаны с изменениями фазового состава керамик, вызванных фазовыми трансформациями моноклинной фазы в тетрагональную, которые в свою очередь сопровождаются, как это видно из данным анализа морфологических изменений, уменьшением размеров зерен и формированием более плотной упаковки зерен, тем самым создавая больше межзеренных границ, а также снижая пористость. При термошоковом воздействии, быстрый нагрев образцов керамик приводит к проникновению кислорода из атмосферы в приповерхностный слой, который в случае стабилизированных керамик, представляет

собой плотноупакованными мелкодисперсными зернами, заполняющими межзеренное пространство Al_2O_3 матрицы. В данном случае сдерживание процессов диффузии кислорода приводит к увеличению сопротивляемости к охрупчиванию и формированию микрострессовых включений, способных дестабилизировать приповерхностный слой. При этом снижение пористости за счет уменьшения размеров зерен, также снижает вероятность деструкции при внешних воздействиях, обусловленных термическим нагревом и резким перепадом температур. В свою очередь стабилизация фазового состава керамик за счет вариации концентрации стабилизирующего допанта приводит к снижению стрессовых микронапряжений в кристаллической структуре, что также увеличивает устойчивость к внешним воздействиям [13, 19]. Однако, наблюдаемое снижение сопротивляемости к процессам термошоковых воздействий при больших концентрациях стабилизирующего допанта Y_2O_3 в составе керамик, обусловлено двумя факторами. Во-первых, при большой концентрации стабилизирующего допанта полное вытеснение моноклинной и тетрагональной фазы в составе керамик с последующим доминированием фазы пироклора приводит к росту зерен пироклора, что в свою очередь приводит к уменьшению количества границ зерен в составе керамик, тем самым уменьшая дислокационную плотность, которая сдерживала распространение микротрещин в поврежденном слое. Во-вторых, при больших концентрациях Y_2O_3 в составе керамик происходит формирование включений в виде зерен $Y_2Al_5O_{12}$, которые образуются в составе Al_2O_3 матрицы, что приводит к ее дестабилизации и разупрочнению. Таким образом, можно сделать вывод о том, что добавление в состав Y_2O_3 при заданных концентрациях позволяет варьировать сопротивляемость керамик к внешним воздействиям, включая механические нагрузки и термострессовые воздействия. Также следует отметить, что немаловажную роль в устойчивости керамик к термострессовым воздействиям играет их теплопроводность, изменение которой обуславливает скорость передачи тепла от поверхности вглубь материала. При снижении теплопроводности керамик скорость передачи тепла замедляется, что в свою очередь приводит к созданию градиента температур в образцах и способствует меньшему воздействию на кристаллическую структуру тепловых воздействий, тем самым снижая вероятность образования в керамике термически дестабилизированных областей за счет изменений тепловых колебаний кристаллической решетки. Также в данном случае, изменение фазового состава керамик приводит к снижению коэффициента термического расширения, что также способствует уменьшению вклада термической дестабилизации кристаллической структуры керамик при длительном термическом воздействии или резком изменении температур.

На рисунке 5а приведены результаты испытаний образцов на теплоизоляцию, включающих в себя нагрев образцов с одной из сторон и измерением разности температур с лицевой стороны (с которой осуществлялся нагрев) и обратной стороны образца. Данные приведены в виде разности температур по истечению 100 часов с лицевой и обратной сторон керамик в случае вариации температур испытаний с 500 до 1500 °С. Представленные зависимости наглядно демонстрируют не только роль изменения фазового состава керамик, обусловленного вариацией концентрации стабилизирующего допанта в составе керамик, но влияние температуры нагрева на процессы теплопереноса, и как следствие, эффективность теплоизоляции. Согласно полученным данным оценки разности температур с лицевой и обратной сторон керамик видно, что добавление в состав керамик стабилизирующего допанта Y_2O_3 приводит к увеличению разности температур, которое наиболее проявлено при высоких температурах воздействия. При этом наблюдаемые изменения в разнице температур с лицевой стороны (с той с которой осуществляется нагрев) и обратной в зависимости от соотношения компонент в составе керамик свидетельствуют о том, что изменение фазового состава керамик приводит к росту теплоизоляционных характеристик, которые наиболее проявлены для образцов в составе которых доминирует фаза пироклора. В данном случае рост эффективности сдерживания процессов теплопереноса в керамиках может быть объяснен тем, что при добавлении в состава Y_2O_3 процессы фазовых трансформаций сопровождаются образованием кислородных вакансий в результате процессов замещения $Zr^{4+} \rightarrow Y^{3+}$, появление которых в составе керамик обусловлено необходимостью соблюдения электронейтральности в кристаллической решетке. Рост концентрации кислородных вакансий в свою очередь приводит к созданию дополнительных рассеивающих центров для тепловых фононов, что приводит к их замедлению при теплопередаче. Также свою роль в процессах замедления теплопередачи играют и размерные эффекты, связанные с уменьшением размеров зерен, что приводит к созданию большого количества барьерных границ, что при баллистической передачи тепла фононами также приводит к увеличению эффекта перерассеяния и замедлению теплообмена [20]. Следует также отметить, что в случае больших концентраций стабилизирующего допанта Y_2O_3 , при которых размерный эффект менее выражен, рост эффективности сдерживания процессов теплопередачи обусловлен доминированием в составе концентрации кислородных вакансий, большая плотность которых играет ключевую роль в замедлении теплопередачи.



а)



б)

Рисунок 5. Результаты оценки теплоизоляционных характеристик исследуемых керамик: (а) результаты сравнительного анализа разности температур с лицевой и обратной сторон керамик при определении их теплоизоляционных свойств в зависимости от вариации температуры нагрева, а также при изменении концентрации стабилизирующего допанта; (б) сравнительная диаграмма оценки эффективности теплоизоляции в зависимости от вариации состава керамик и изменения температуры испытаний

На рисунке 5б представлены результаты оценки величины эффективности теплоизоляции, которые были рассчитаны путем сравнения результатов разности температур при нагреве образцов с одной из сторон и контрольному измерению температуры с обратной стороны. Эффективность теплоизоляции оценивалась путем сравнительного анализа изменений разницы температур между лицевой стороной, на которую осуществляется нагрев и обратной стороны, с которой происходит съем тепла прошедшего через керамику. Данная величина приведена в про-

центном соотношении с целью определения эффективности вариации состава керамик. Данные представлены в процентном соотношении величин, с целью наиболее наглядного отражения разности и эффективности теплоизоляции при вариации температуры воздействия. Согласно представленных данным, в случае нестабилизированных керамик, максимальная эффективность теплоизоляции составляет 15–17% для умеренных температур нагрева (500–700 °C), и снижается до 8–10% для высоких температур (1000–1500 °C). При этом добавление 0,01 М Y_2O_3 в состав керамик приводит к незначительному росту эффективности теплоизоляции во всем измеряемом диапазоне, в виду того, что при малых концентрациях основные изменения связаны со структурным упорядочением керамик, в то время как процессы фазовых трансформаций при малых концентрациях практически не выражены. При увеличении концентрации стабилизирующего допанта в составе керамик, инициируемые процессы фазовых трансформаций приводят к росту эффективности сдерживания процессов теплопередачи, тем самым увеличивая эффективность теплоизоляции, величина которой в случае температур 500 °C для керамик с доминирующей в составе фазой пироклора составляет порядка 35–40%, а в случае высоких температур порядка 20–25%. При этом в случае керамик с концентрацией допанта 0,10–0,20 М наблюдается сохранение эффективности в случае температур нагрева 1000–1500 °C, что свидетельствует о том, что при высоких температурах нагрева, сдерживание теплообмена зависит от коэффициента термического расширения, который в случае керамик с фазой пироклора значительно ниже, чем для керамик с доминирующими моноклинной и тетрагональной фазами.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе рассмотрено влияние изменения фазового состава и морфологических особенностей композитных Al_2O_3 – ZrO_2 керамик при стабилизации их Y_2O_3 , на устойчивость к термическим воздействиям и теплоизоляционным свойствам, определяющим перспективность использования данного типа керамик в качестве термобарьерных материалов.

Согласно результатам рентгенофазового анализа и данных морфологических исследований была установлена кинетика изменения фазового состава в Al_2O_3 – ZrO_2 керамиках при стабилизации их Y_2O_3 в зависимости от вариации концентрации стабилизирующего допанта. Основные изменения фазового состава обусловлены полиморфными трансформациями, имеющими прямую зависимость от концентрации допанта Y_2O_3 . При малых концентрациях доминирующую роль в полиморфных трансформациях играют процессы типа $m - ZrO_2 \rightarrow t - Zr(Y)O_2$, сопровождающиеся вытеснением моноклинной фазы в структуре керамик. При больших концентрациях стабилизирующего допанта доминирующую роль в составе играет фаза пироклора $Y_2Zr_2O_7$, появление ко-

торой обусловлено увеличением доли допанта, и как следствие, фазовым трансформациям, возникающим при росте процессов замещения $Zr^{4+} \rightarrow Y^{3+}$, приводящему к росту зерен пироклора.

В ходе оценки устойчивости керамик к термошоковым воздействиям, вызванным резкими изменениями температурных режимов, было установлено, что формирование мелкодисперсной фракции пироклора приводит к увеличению сопротивляемости к деструкции прочностных характеристик и повышению устойчивости к процессам высокотемпературного окисления. При этом укрупнение зерен, наблюдаемое при больших концентрациях стабилизирующего допанта, приводит к снижению сопротивляемости к разупрочнению примерно в 1,5–2 раза по сравнению с керамиками, в составе которых доминируют мелкодисперсные включения.

При оценке теплоизоляционных характеристик керамик было установлено, что увеличение эффективности теплоизоляции напрямую связано с фазовым составом керамик, а также обусловлено как концентрацией кислородных вакансий в составе, так и коэффициентом термического расширения.

Благодарность

Исследование финансируется Комитетом науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (No. BR21882237).

ЛИТЕРАТУРА / REFERENCES

1. Basu B., Vleugels J., Van Der Biest O. ZrO_2 – Al_2O_3 composites with tailored toughness //Journal of alloys and compounds. – 2004. – Vol 372, No. 1–2. – P. 278–284.
2. Zygmontowicz J. et al. Al_2O_3/ZrO_2 materials as an environmentally friendly solution for linear infrastructure applications //Materials. – 2021. – Vol. 14, No. 9. – P. 2375.
3. Shvydyuk K. O. et al. Holistic Characterization of MgO – Al_2O_3 , MgO – $CaZrO_3$, and Y_2O_3 – ZrO_2 Ceramic Composites for Aerospace Propulsion Systems //Ceramics. – 2024. – Vol. 7, No. 1. – P. 364–384.
4. Zhou J. et al. The phase-stabilized behavior of Sc_2O_3 – Y_2O_3 co-doped ZrO_2 nanopowders by co-precipitation synthesis //Ceramics International. – 2024. – Vol. 50, No. 13. – P. 24823–24834.
5. Tripathi H., Sharma N., Sharma J. D. Synergistic effects of ZrO_2 and La_2O_3 on the phase stability and optical–electronic properties of Y_2O_3 //International Journal of Applied Ceramic Technology. – 2025. – Vol. 22, No. 3. – P. e14909.
6. Liu B. et al. Drying kinetics and energy efficiency of Y_2O_3 – CeO_2 co-doped ZrO_2 powder under microwave heating //Ceramics International. – 2024. – Vol. 50, No. 21. – P. 43192–43205.
7. Salehi S. et al. Syngas production from dry reforming of glycerol by the NiO/M – Al_2O_3 catalysts: effect of various support promoters and various ZrO_2 content //Journal of CO_2 Utilization. – 2024. – Vol. 81. – P. 102737.
8. Zhao K. et al. Mechanical properties, thermal shock resistance and stress evolution of plasma-sprayed 56 wt% Y_2O_3 -stabilized ZrO_2 thick thermal barrier coatings

- //Surface and Coatings Technology. – 2024. – Vol. 494. – P. 131352.
9. Chen Z. et al. The effect of fibers addition on the microstructure and mechanical properties of ZrO₂ fibers toughened Al₂O₃/ZrO₂ (Y₂O₃) solidified ceramics //Materials Today Communications. – 2024. – Vol. 40. – P. 109817.
10. Kenzhina I. E. et al. Effects of the Zirconia-Alumina Composite Ceramics with Varying Compositions on Resistance to Helium Swelling //ES Materials & Manufacturing. – 2025. – Vol. 28. – P. 1463.
11. Khan A. R. et al. Study of microstructure, thermodynamic and powder properties of nano Y₂O₃, TiO₂, ZrO₂ dispersed W–Ni–Nb–Mo–Zr alloys //Materials Chemistry and Physics. – 2024. – Vol. 311. – P. 128567.
12. Ameta P. et al. Adsorption prospects of ultrafine, cubic 8 mol.% Y₂O₃-stabilized ZrO₂ nanoparticles //Journal of the American Ceramic Society. – 2024. – Vol. 107, No. 1. – P. 417–429.
13. Kenzhina I. E. et al. Study of Phase Transformations in ZrO₂ Ceramics Stabilized by Y₂O₃ and Their Role in Changing Strength Characteristics and Heat Resistance //Sustainability. – 2025. – Vol. 17, No. 10. – P. 4284.
14. Meena K. L., Mozammil S., Koshta E. Effect on Mechanical and Physical Properties of Microwave-Sintered Alumina Nanocomposite on Addition of ZrO₂ and MgO //Evolutionary Manufacturing, Design and Operational Practices for Resource and Environmental Sustainability. – 2024. – P. 113–123.
15. Kenzhina I. E. et al. Influence of the Change of Phase Composition of (1–x)ZrO₂–xAl₂O₃ Ceramics on the Resistance to Hydrogen Embrittlement //Materials. – 2023. – Vol 16, No. 22. – P. 7072.
16. Liu Y. et al. Irradiation response of Al₂O₃-ZrO₂ ceramic composite under He ion irradiation //Journal of the European Ceramic Society. – 2021. – Vol. 41, No. 4. – P. 2883–2891.
17. Franco D. et al. Wear behavior at high temperature of ZrO₂–Y₂O₃ (YSZ) plasma-sprayed coatings //Journal of Materials Science. – 2024. – Vol. 59, No. 1. – P. 20–37.
18. Zhu X. et al. Effect of Y₂O₃ doping content on phase composition, mechanical properties and cavitation erosion performance of ZrO₂ ceramics //Ceramics International. – 2024. – Vol. 50, No. 9. – P. 14718–14730.
19. Zhao Z. et al. Effect of Y₂O₃ on crystallization and mechanical properties of sodium aluminum silicate glass containing ZrO₂ //Ceramics International. – 2024. – Vol. 50, No. 17. – P. 29613–29619.
20. Gopinath N. K. et al. High emittance plasma sprayed ZrO₂-Y₂O₃/La₂Zr₂O₇ thermal barrier coatings for potential application in scramjets //Applied Surface Science. – 2024. – Vol. 652. – P. 159324.

**КОМПОЗИТТІК КЕРАМИКАЛАРДАҒЫ ӨЛШЕМДІК ӘСЕРЛЕР МЕН ФАЗАЛЫҚ
ПОЛИМОРФТЫҚ ТҮРЛЕНУЛЕРДІҢ ЖЫЛУ ИЗОЛЯЦИЯЛЫҚ ҚАСИЕТТЕРІ
МЕН СЫРТҚЫ ӘСЕРЛЕРГЕ ТӨЗІМДІЛІККЕ ТИГІЗЕТІН ЫҚПАЛЫ**

И. Е. Кенжина^{1,2}, А. Л. Козловский^{1,2*}, Ч. Хаметов³, П. Блынский^{1,4}

¹ *Satbayev University, Алматы, Қазақстан*

² *ҚР Атом энергиясы жөніндегі агенттігінің «Ядролық физика институты» РМК, Алматы, Қазақстан*

³ *Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан*

⁴ *Ұлттық зерттеу Томск политехникалық университеті, Томск, Ресей*

** Байланыс үшін E-mail: kozlovskiy.a@inp.kz*

Бұл жұмыста ZrO₂ негізіндегі керамикаларда Y₂O₃ тұрақтандырғыш қоспасының концентрациясын өзгерту кезінде туындайтын фазалық полиморфтық түрленулермен байланысты дән морфологиясының өзгерістерінің жылу-физикалық параметрлер мен температураның күрт өзгерістері, механикалық жүктемелер мен ұзақ мерзімді термиялық қыздыру сияқты сыртқы әсерлерге төзімділікке әсері қарастырылды. Y₂O₃ тұрақтандырғышының концентрациясы өзгерген кездегі фазалық түрленулерді бағалау нәтижесінде, қоспа концентрациясы төмен болған жағдайда, m – ZrO₂ → t – Zr(Y)O₂ түріндегі түрленулер басым рөл атқаратыны анықталды. Ал қоспа мөлшері 0,10 мольден жоғары болғанда, пироклор фазасы Y₂Zr₂O₇ түзілуімен жүретін процестер басым болып, ол күйдіру кезінде дәндердің іріленуіне әкеледі. Жылу оқшаулау қасиеттеріне жүргізілген бағалау нәтижесінде, композиттік керамикалар құрамында пироклор фазасы Y₂Zr₂O₇ басым болған жағдайда, материалдардың жылуөткізгіштігі төмендеп, жылуизоляция тиімділігі артады, бұл тек төмен температуралар жағдайында ғана емес, сондай-ақ ұзақ мерзімді жоғары температуралық қыздыру кезінде де байқалады. Температураның күрт өзгеруінен болатын термошоктық әсерлерге төзімділікті бағалау, пироклор фазасы басым болатын композиттік керамикалардың сыртқы әсерлерге тұрақтылығы мен төмен жылуөткізгіштігі есебінен температуралық ауытқуларға жақсы төзімділікке ие екенін көрсетті.

Түйін сөздер: *композиттік керамикалар, термошоктық әсер, жылуизоляциялық материалдар, полиморфты мартенситтік түрленулер, беріктік сипаттамалар.*

THE ROLE OF SIZE EFFECTS AND PHASE POLYMORPHOUS TRANSFORMATIONS
IN COMPOSITE CERAMICS ON THERMAL INSULATION CHARACTERISTICS
AND RESISTANCE TO EXTERNAL INFLUENCES

I. E. Kenzhina^{1,2}, A. L. Kozlovskiy^{1,2*}, Ch. Khametov³, P. Blynskiy^{1,4}

¹ Satbayev University, Almaty, Kazakhstan

² RSE "Institute of Nuclear Physics" of the Agency of the Republic of Kazakhstan for Atomic Energy, Almaty, Kazakhstan

³ NJSC L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

⁴ National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia

* E-mail for contacts: kozlovskiy.a@inp.kz

The paper examines the role of changes in grain morphology associated with the processes of phase polymorphic transformations in ZrO_2 with varying concentrations of the stabilizing dopant Y_2O_3 on changes in thermophysical parameters, as well as resistance to external influences caused by sudden changes in temperature, mechanical loads, and prolonged thermal heating. An assessment of phase transformations caused by a change in the concentration of the stabilizing dopant Y_2O_3 showed that at low concentrations, the dominant role in phase changes is caused by processes of the $m - ZrO_2 \rightarrow t - Zr(Y)O_2$ type, while at dopant concentrations above 0.10 M, processes with the formation of the pyrochlore phase $Y_2Zr_2O_7$ dominate, the phase formation processes of which led to grain coarsening during sintering. According to the assessment of thermal insulation characteristics, it was established that the dominance of the pyrochlore $Y_2Zr_2O_7$ phase in the composition of composite ceramics leads to a decrease in the thermal conductivity of ceramics, as well as an increase in the efficiency of thermal insulation, both in the case of low temperatures and under prolonged exposure to high-temperature heating. An assessment of the resistance of ceramics to thermal shock processes associated with a sharp change in heating-cooling temperature showed that composite ceramics with a dominant pyrochlore phase in the composition have greater resistance to temperature changes due to maintaining stability to external influences and low thermal conductivity.

Keywords: composite ceramics, thermal shock effect, thermal insulation materials, polymorphic martensitic transformations, strength characteristics.

<https://doi.org/10.52676/1729-7885-2025-4-41-46>

УДК 538.94

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ И ДЕФЕКТОВ НА ЭЛАСТИЧНОСТЬ ДЕФОРМИРОВАННОГО ПРИ РАСТЯЖЕНИИ АЛМАЗА

Т. М. Инербаев, А. У. Абуова, Ф. У. Абуова, Г. А. Қаптағай,
Н. Мерәлі, Ж. К. Зәкиева, Б. М. Сатанова*, А. Раскалиев

Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

** E-mail для контактов: clever_s.balzhan@mail.ru*

В данной работе в рамках классической молекулярной динамики исследована диаграмма деформирования алмаза при растяжении, ориентированном в направлении [111], в области температур от 1 до 1700 К. Рассмотрены идеальная структура алмаза, а также структура, содержащая относительно высокую концентрацию дефектов. Для изучения эластичности получаемых при различной температуре при растяжении структур проведено анизотропное моделирование при атмосферном давлении и рассчитаны величины деформации и плотности структуры во времени. Показана эластичность обеих структур в широком диапазоне величин деформации, характерных для каждого значения температуры. Также показана возможность достижения алмазом пластического состояния в узкой области величины растяжения перед полным разрушением в области высоких температур. При температуре ≤ 500 К алмаз сохраняет чисто упругое поведение вплоть до разрушения. При температурах выше 700 К вблизи предела прочности наблюдаются признаки локальной пластической деформации в виде плавного изгиба кристаллической решетки. При $T \geq 1600$ К идеальная структура разрушается уже на этапе эквilibрирования, что является признаком начала графитизации. Наличие точечного дефекта снижает прочность и предельные деформации, и структура разрушается при более низких напряжениях при $T \geq 1300$ К.

Ключевые слова: алмаз, алмазные пленки, молекулярная динамика, деформация, эластичность.

ВВЕДЕНИЕ

Алмаз и алмазные пленки применяются в медицине, инструментах механической обработки, микроэлектронике и квантовых компьютерах благодаря исключительной твердости, теплопроводности и химической стойкости. Однако высокая стоимость добычи и синтеза алмаза, а также производства пленок и напыления требует разработки новых методов их получения. Для этого требуются знания прочности алмазов и предела текучести [1, 2]. Исключительный предел текучести алмаза возникает из-за высокой плотности сильных атомных связей и строго направленной природы этих связей. Экспериментальные данные о пределе текучести алмаза практически отсутствуют ввиду трудности его деформирования и возникающей в отсутствие кислорода при температуре выше 3550–3700 °С графитизации [3], в то время как оценочная температура плавления алмаза [4] составляет 3300 К. Эксперимент по индентированию [5] показал, что графитизация алмаза происходит при давлении ниже 100 ГПа [1, 2].

Экспериментальное исследование перехода алмаза к пластической деформации посредством сжатия показало, что дифференциальный предел текучести алмазного порошка снижается с 16 ГПа до 4 ГПа при повышении температуры от 1100 до 1550 °С [6]. Эксперимент по сдавливанию алмаза на алмазной подложке (anvil) при комнатной температуре и ниже показал, что предел текучести алмаза [7] составляет 130–140 ГПа. Более поздние исследования показали, что предел текучести при комнатной температуре в зависимости от типа давления [8] составляет 210 ГПа

по оценке авторов работы [9]. Согласно предположению авторов [9], предел текучести составляет 144–168 ГПа, авторы работы [10] в эксперименте по получению аморфного углерода из алмаза оценили это значение в 55 ГПа [3–5].

При помощи методов *ab initio* было показано, что при нагрузке 90–100 ГПа при растяжении или сдвиге алмаз становится нестабильным и пластичным [11, 12]. Другие оценки ожидаемого давления пластической деформации составили ~45–48 ГПа в зависимости от способа сдавливания, а расчеты показали [13], что пластические вмятины могут быть заметны при ~70 ГПа и до предельного давления в ~85 ГПа при пределе текучести в 35 ГПа [6–8].

Для более масштабных теоретических исследований, способных в той или иной мере учесть наличие дефектов трансляционной симметрии алмаза, используется метод молекулярной динамики, позволяющий исследовать как свойства нанокристаллического алмаза [14], пентаалмаза [15], так и двойных систем [16]. Так авторы работы [17] показали отсутствие пластической деформации нанокристаллического алмаза [9–10]. Однако эластичность алмаза при растяжении в широком диапазоне температур при различном количестве дислокаций в нем практически не исследовалась [11–13].

Целью данной работы является изучение эластичности алмаза. Для этого проведено молекулярно-динамическое исследование диаграммы деформирования идеальной и обладающей дефектом структур алмаза в широкой области температур, а также моделирование при атмосферном давлении анизотропной

релаксации деформированных структур [14–16]. Научная новизна работы состоит в том, что впервые проведено систематическое исследование эластичности идеального и дефектного алмаза при одноосном растяжении вдоль направления [111] в широком диапазоне температур (1–1700 К) с использованием анизотропной релаксации в рамках молекулярной динамики. Показано, что при температурах выше 700 К вблизи предела прочности проявляются признаки локальной пластической деформации, а наличие точечного дефекта существенно снижает механическую стабильность и диапазон упругого поведения. Полученные результаты расширяют понимание механических свойств алмаза в экстремальных условиях и могут быть использованы при разработке алмазных покрытий и наноустройств, работающих при высоких температурах и нагрузках.

ДЕТАЛИ ВЫЧИСЛЕНИЙ. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЙ

Для моделирования структуры алмаза и его свойств был использован программный пакет LAMMPS [18] (версия 04Feb2025) [17]. Структура идеальной кристаллической решётки алмаза, ось z в которой ориентирована вдоль кристаллографического направления [111], была создана при помощи программы AtomsK [19] и состояла из 1296 атомов, а размер модели составил $15,113 \times 26,21 \times 15,54$ Å. Из геометрического [18] центра этой структуры был удалён 1 атом углерода (точечный дефект, вакансия решётки), в результате чего была дополнительно создана ячейка с концентрацией дефектов $1,62 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$.

Для описания атомов углерода была выбрана модель AIREBO-M (AIREBO-Morse) [19–20], показавшая высокую точность при высоких давлениях благодаря замене взаимодействия Леннард-Джонса на нерасходящийся потенциал Морзе, а также при сравнении различных молекулярно-динамических моделей с методом DFT [21]. Модель была модифицирована: адаптивный параметр отсечки потенциала [21–22] был установлен на 2,0 Å (вместо оригинального 1,7 Å) во избежание нефизического высокого напряжения растяжения [22–25].

Моделирование проводилось в 3 этапа:

- 1) Для каждого значения температуры проводилось предварительное эквilibрирование структуры в изотропном NPT-ансамбле в течение 250 пс.
- 2) Растяжение моделей проводилось вдоль оси z , контроль давления (компонентов тензора напряжений, движущих сил) по которой проводился независимо от осей x и y в частично анизотропном ансамбле NPT для более корректного описания изменения плотности алмаза [23–24].
- 3) Изучение эластичности проводилось в анизотропном NPT-ансамбле при атмосферном давлении [25–27].

Шаг интегрирования на всех этапах составил 0,1 фс, скорость деформирования составила $4 \times 10^{-6} \text{ фс}^{-1}$. Внешнее давление составляло 1 бар. Структуры были исследованы в области температур от 1 К до 2000 К. Периодические граничные условия были применены. Для определения величины нагрузки σ вдоль оси z была рассчитана P_{zz} компонента тензора напряжения структуры. Величина деформации ε определялась как соотношение размера системы по оси z к стартовому размеру [28].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рисунке 1 представлена диаграмма ориентированного по направлению [111] по оси z деформирования алмаза при растяжении. При температуре 1600 К и выше в рамках данной модели бездефектная структура алмаза разрушается на этапе эквilibрирования, что может указывать на начало процесса графитизации алмаза. Полученные результаты качественно и достаточно точно количественно совпадают с результатами моделирования из первых принципов [12, 26–28]: в отсутствии теплового движения атомов углерода критическое значение $\varepsilon = 1,12\text{--}1,13$ ($\sigma \approx 90$ ГПа). В данной работе аналогичные значения для температуры 1 К составили $\varepsilon = 1,15$ и $\sigma = 98$ ГПа. Дальнейшее растяжение не приводит к росту необходимой нагрузки вплоть до полного разрушения ($\varepsilon = 1,17$). Аналогичная область ε от 1,15 до 1,17 (при температуре 1 К) область величины деформации наблюдалась в работах [26, 27] при $\varepsilon = 1,13\text{--}1,15$, где также не наблюдался рост необходимого давления для дальнейшего растяжения.

Характер полученных кривых ε - σ отличается от нанокристаллического [17], где наклон вплоть до разрушения практически не изменялся и пластические деформации не наблюдались. Здесь же пластические деформации (сохранение связей с искажением кристаллической решётки) наблюдались вблизи точек разрушения кристалла при температурах от 700 К и выше, о чём также свидетельствует плавный перегиб линий ε - σ перед разрушением. Это качественно согласуется с предположением, что текучесть алмаза должна наблюдаться при высокой температуре.

Для оценки эластичности структуры была проведена анизотропная релаксация структур на различных этапах растяжения. На рисунке 2 приведены времена релаксации линейного размера и плотности растянутой структуры идеального алмаза при атмосферном давлении и различной температуре. Разброс значений плотности кристалла по окончании процесса релаксации (ярко выражено для $\varepsilon = 1,05$) вызван тепловым расширением алмаза. Видно, что в рассматриваемой области температур для структур при $\varepsilon = 1,05$ при снятии растягивающего напряжения структуры возвращаются в исходное состояние, что указывает на эластичность структуры до давления в ~ 55 ГПа в выбранной области температур.

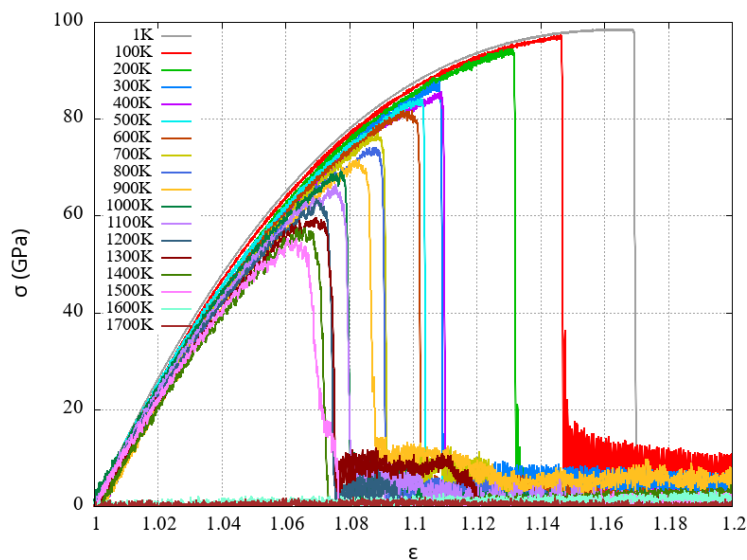


Рисунок 1. Диаграмма деформирования идеальной структуры алмаза при растяжении в направлении [111] в области температур от 1 до 1700 K

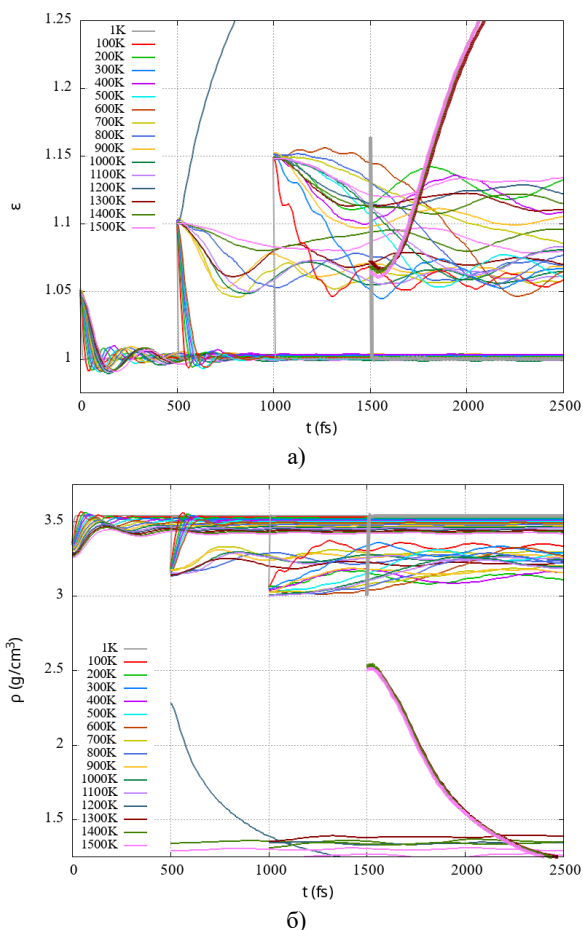


Рисунок 2. Зависимости линейной деформации (а) и соответствующей плотности алмаза (б) от времени при релаксации идеальной структуры, растянутой в направлении [111] на величины $\epsilon = 1,05, 1,10, 1,15$ в области температур от 1 до 1500 K, а также толстыми линиями для $\epsilon \approx 1,162$ и $1,167$ при 1 K и $\epsilon \approx 1,072, 1,068$ и $1,062$ при 1300, 1400 и 1500 K, соответственно. Линии представлены со сдвигом 500 фс.

При достижении $\epsilon = 1,10$ ($\sigma \leq 86$ ГПа) эластические свойства структура проявляет только при температуре 600 K и ниже. При более высоких температурах вплоть до 1100 K включительно кристаллическая структура алмаза является полностью или частично разрушенной, однако её плотность в начальный момент релаксации равна плотности растянутой кристаллической фазы ($T \leq 600$ K) и остаётся близкой алмазной в дальнейшем, что может свидетельствовать о вызванной вследствие накопления дефектов локальной пластичности структуры ввиду имеющих место флуктуаций плотности. Это качественно согласуется с результатами экспериментальной работы [7], в которой текучесть алмаза наблюдалась при снятии давления на структуру. Однако более детальная характеристика деформации структуры алмаза после снятия напряжения требует отдельного исследования. При температуре от 1200 K и выше плотность структуры составляет $1,3\text{--}1,4$ г/см³, что в несколько раз ниже плотности алмаза. Состояние структуры при 1300 K является статистическим исключением.

При достижении $\epsilon = 1,15$ ($\sigma \leq 97$ ГПа) эластическое поведение наблюдается только при температуре 1 K, а флуктуации плотности при температурах становятся выше, что указывает на повышение неустойчивости структур. Эластичность наблюдается также при температуре 1 K в упомянутой ранее области ϵ от 1,15 до 1,17, где наклон кривой ϵ - σ близок и ниже нуля.

На рисунке 3 показана диаграмма деформирования неидеального кристалла при растяжении вдоль направления [111]. Ожидается, полное разрушение структур происходит при более низких значениях ϵ и σ , чем для идеального кристалла. Наличие дефекта приводит к раннему разрушению структуры уже при температуре 1300 K и выше.

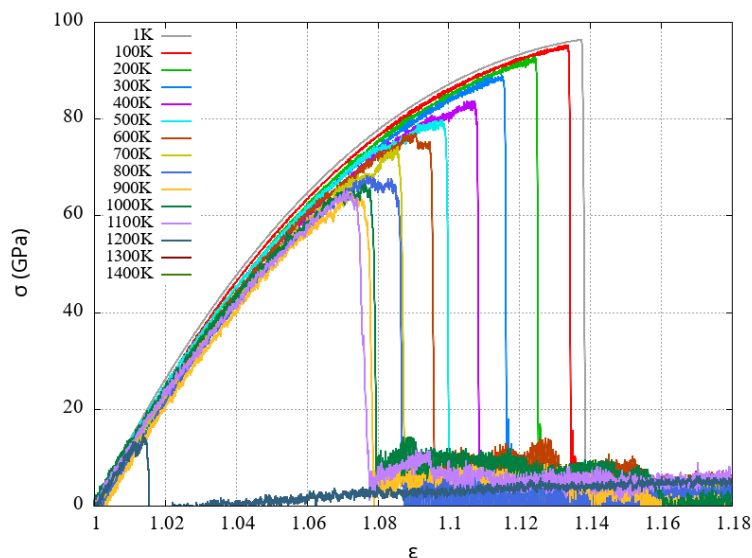


Рисунок 3. Диаграмма деформирования обладающей точечным дефектом структуры алмаза при растяжении в направлении $[111]$ в области температур от 1 до 1400 K.

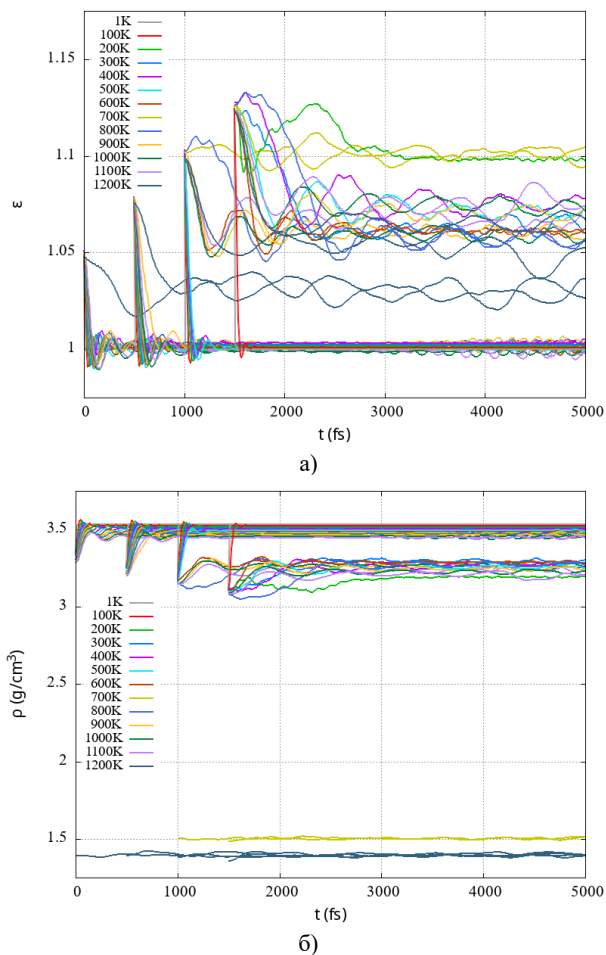


Рисунок 4. Зависимости линейной деформации (а) и соответствующей плотности алмаза (б) от времени при релаксации обладающей дефектом структуры, растянутой в направлении $[111]$ на величины $\epsilon = 1,050, 1,075, 1,100$ и $1,125$ со сдвигом 500 фс в области температур от 1 до 1200 K

Разрушение структуры неидеального алмаза начинается с локальной деформации структуры вблизи точечного дефекта. В остальном наличие одного точечного дефекта, который в итоге приводит к очень высокой их концентрации, к качественным изменениям характера кривой ϵ - σ не приводит.

Как и для идеального случая, локальная пластическая деформация наблюдается при относительно высокой температуре в узкой области величины деформации вблизи точки разрушения (разлома). Аналогично, при температуре 500 K и ниже наблюдается только эластическое поведение решётки вплоть до разрушения.

На рисунке 4 приведены времена релаксации линейного размера и плотности растянутой структуры алмаза с дефектом при атмосферном давлении и различной температуре. При $\epsilon = 1,050$ и $1,075$ наблюдается эластическое поведение решётки при температурах до 1100 K включительно. Состояние структуры при 700 K является статистическим исключением.

Важно отметить, что на более длительных временах релаксации при температуре 1100 K и начальном $\epsilon = 1,100$ наблюдается спонтанное расширение структуры по трём направлениям и падение плотности до $1,26$ – $1,27$ г/см³.

Обобщая результаты, можно предположить, что пластичность алмаза предположительно может быть выявлена при относительно высокой температуре для идеального и неидеального кристаллов при давлении ~ 50 ГПа и выше.

Выводы

Исследование эластичности структуры алмаза при растяжении в направлении $[111]$ методом классической молекулярной динамики в рамках модели AIREBO-M показало, что при температуре 500 K и ниже как идеальный, так и обладающий дефектом алмаз проявляют эластические свойства вплоть до раз-

рушения. При более высокой температуре вблизи границы разрушения наблюдается пластическая деформация кристаллической решётки.

Наличие точечного дефекта приводит к снижению максимальной нагрузки, при которой структура способна проявлять эластические свойства, а также предельных нагрузок, которые способна выдержать структура, не разрушаясь. Также наличие дефекта снижает стабильность структуры при температуре выше 1000 К. А именно, дефектная структура разрушается при более низких напряжениях и температурах (уже при $T \geq 1300$ К). Эластичность сохраняется до $\varepsilon \approx 1,075$ при $T \leq 1100$ К, но при $\varepsilon = 1,100$ и $T = 1100$ К наблюдается спонтанное расширение и падение плотности, что является признаком потери стабильности.

Финансирование

Работа выполнена в рамках проекта МОН РК AP23484367 «Исследование предела текучести алмаза для развития технологии производства крупных кристаллов».

ЛИТЕРАТУРА / REFERENCES

1. Sundqvist, B. Carbon under pressure // *Physics Reports*. – 2021. – Vol. 909. – P. 1–73.
2. Field, J. E. The mechanical and strength properties of diamond // *Reports on Progress in Physics*. – 2012. – Vol. 75(12). – 126505.
3. Evans, T., & James, P. F. A study of the transformation of diamond to graphite // *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*. – 1964. – Vol. 277(1369). – P. 260–269.
4. Wilks, J., & Wilks, E. Properties and applications of diamond. Butterworth-Heinemann, Oxford, 1991, P. 214–227.
5. Gogotsi, Y. G., Kailer, A., & Nickel, K. G. Transformation of diamond to graphite // *Nature*. – 1999. – Vol. 401(6754). – P. 663–664.
6. Weidner, D. J., Wang, Y., & Vaughan, M. T. Strength of diamond // *Science*. – 1994. – Vol. 266(5184). – P. 419–422.
7. Eremets, M. I., Trojan, I. A., Gwaze, P., Huth, J., Boehler, R., & Blank, V. D. The strength of diamond // *Applied Physics Letters*. – 2005. – Vol. 87(14).
8. Lin, Y., Zhang, L., Mao, H. K., Chow, P., Xiao, Y., Baldini, M., Shu, J., & Mao, W. L. Amorphous diamond: a high-pressure superhard carbon allotrope // *Physical Review Letters*. – 2011. – Vol. 107(17). – 175504.
9. Solopova, N. A., Dubrovinskaya, N., & Dubrovinsky, L. Raman spectroscopy of glassy carbon up to 60 GPa // *Applied Physics Letters*. – 2013. – Vol. 102(12).
10. Yao, M., Fan, X., Zhang, W., Bao, Y., Liu, R., Sundqvist, B., & Liu, B. Uniaxial-stress-driven transformation in cold compressed glassy carbon // *Applied Physics Letters*. – 2017. – Vol. 111(10).
11. Chacham, H., & Kleinman, L. Instabilities in diamond under high shear stress // *Physical Review Letters*. – 2000. – Vol. 85(23). – 4904.
12. Telling, R. H., Pickard, C. J., Payne, M. C., & Field, J. E. Theoretical strength and cleavage of diamond // *Physical Review Letters*. – 2000. – Vol. 84(22). – 5160.
13. Ruoff, A. L. On the yield strength of diamond // *Journal of Applied Physics*. – 1979. – Vol. 50(5). – P. 3354–3356.
14. Vidable, G. G., Gonzalez, R. I., Valencia, F. J., Amigo, N., Tramontina, D., & Bringa, E. M. Simulations of plasticity in diamond nanoparticles showing ultrahigh strength // *Diamond and Related Materials*. – 2022. – Vol. 126. – 109109.
15. Felix, L. C., Tromer, R. M., Woellner, C. F., Tiwary, C. S., & Galvao, D. S. Mechanical response of pentadiamond: A DFT and molecular dynamics study // *Physica B: Condensed Matter*. – 2022. – Vol. 629. – 413576.
16. Zhou, J., Li, Y., Lu, C., Li, H., Zheng, W., Ma, Y., Gao, Z., Yang, J., & He, Y. Molecular dynamics simulation of the tensile response and deformation mechanism of diamond/TiC combinations // *Computational Materials Science*. – 2022. – Vol. 215. – 111779.
17. Huang, C., Peng, X., Yang, B., Chen, X., Li, Q., Yin, D., & Fu, T. Effects of strain rate and annealing temperature on tensile properties of nanocrystalline diamond // *Carbon*. – 2018. – Vol. 136. – P. 320–328.
18. Thompson, A. P., Aktulga, H. M., Berger, R., Bolintineanu, D. S., Brown, W. M., Crozier, P. S., Veld, P. J., Kohlmeyer, A., Moore, S. G., Nguyen, T. D., Shan, R., Stevens, M. J., Tranchida, J., Trott, C., & Plimpton, S. J. LAMMPS—a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales // *Computer Physics Communications*. – 2022. – Vol. 271. – 108171.
19. Hirel, P. Atomsk: A tool for manipulating and converting atomic data files // *Computer Physics Communications*. – 2015. – Vol. 197. – P. 212–219.
20. O’connor, T. C., Andzelm, J., & Robbins, M. O. AIREBO-M: A reactive model for hydrocarbons at extreme pressures // *The Journal of Chemical Physics*. – 2015. – Vol. 142(2).
21. Rozhkov, M. A., Kolesnikova, A., & Romanov, A. Comparison of Interatomic Potentials for Modeling Defects in Graphene Using Molecular Dynamics // *Rev. Adv. Mater. Technol.* – 2024. – Vol. 6. – P. 35–42.
22. Shenderova, O. A., Brenner, D. W., Omeltchenko, A., Su, X., & Yang, L. H. Atomistic modeling of the fracture of polycrystalline diamond // *Physical Review B*. – 2000. – Vol. 61(6). – 3877.
23. Zhan, H., Zhang, G., Tan, V. B., Cheng, Y., Bell, J. M., Zhang, Y. W., & Gu, Y. From brittle to ductile: a structure dependent ductility of diamond nanothread // *Nanoscale*. – 2016. – Vol. 8(21). – P. 11177–11184.
24. Baimova, J. A., Rysaeva, L. K., & Rudskoy, A. I. Deformation behavior of diamond-like phases: Molecular dynamics simulation // *Diamond and Related Materials*. – 2018. – Vol. 81. – P. 154–160.
25. Peng, Q., Chen, G., Huang, Z., Chen, X., Li, A., Cai, X., Zhang, Y., Chen, X. J., & Hu, Z. Molecular Dynamics Insights into Mechanical Stability, Elastic Properties, and Fracture Behavior of PHOT-Graphene // *Materials*. – 2024. – Vol. 17(19). – 4740.
26. Roundy, D., & Cohen, M. L. Ideal strength of diamond, Si, and Ge // *Physical Review B*. – 2001. – Vol. 64(21). – 212103.
27. Luo, X., Liu, Z., Xu, B., Yu, D., Tian, Y., Wang, H. T., & He, J. Compressive strength of diamond from first-principles calculation // *The Journal of Physical Chemistry C*. – 2010. – Vol. 114(41). – P. 17851–17853.

28. Jensen, B. D., Wise, K. E., & Odegard, G. M. Simulation of the elastic and ultimate tensile properties of diamond, graphene, carbon nanotubes, and amorphous carbon using

a revised ReaxFF parametrization // The Journal of Physical Chemistry A. – 2015. – Vol. 119(37). – P. 9710–9721.

ТЕМПЕРАТУРА МЕН АҚАУЛАРДЫҢ СОЗЫЛУ КЕЗІНДЕ ДЕФОРМАЦИЯЛАНҒАН ГАУҺАРДЫҢ СЕРПІМДІЛІГІНЕ ӘСЕРІН ТЕОРИЯЛЫҚ ЗЕРТТЕУ

**Т. М. Инербаев, А. У. Абуова, Ф. У. Абуова, Г. А. Қаптағай,
Н. Мерәлі, Ж. К. Зәкиева, Б. М. Сатанова*, А. Раскалнев**

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

** Байланыс үшін E-mail: clever_s.balzhan@mail.ru*

Бұл жұмыста классикалық молекулалық динамика шеңберінде 1-ден 1700 К-ге дейінгі температура аймағында [111] бағытқа бағытталған созылу кезінде алмаздың деформация диаграммасы зерттелді, Гауһардың идеалды құрылымы, сондай-ақ ақаулардың салыстырмалы түрде жоғары концентрациясын ұстайтын құрылым қарастырылды. Құрылымдардың созылуы кезінде әртүрлі температурада алынған икемділікті зерттеу үшін атмосфералық қысымда анизотропты модельдеу жүргізілді және деформация мен құрылымның уақыт бойынша тығыздығы есептелді. Температураның әр мәніне тән деформация шамаларының кең ауқымында екі құрылымның икемділігі көрсетілген. Сондай-ақ, алмаздың жоғары температура аймағында толық жойылғанға дейін созылу шамасының тар аймағында пластикалық күйге жету мүмкіндігі көрсетілген.

Түйін сөздер: алмаз, алмаз пленкалары, молекулалық динамика, деформация, серпімділік.

THEORETICAL STUDY OF THE EFFECT OF TEMPERATURE AND DEFECTS ON THE ELASTICITY OF A DIAMOND DEFORMED BY STRETCHING

**T. M. Inerbaev, A. U. Abuova, F. U. Abuova, G. A. Kaptagai,
N. Merali, Zh. K. Zakieva, B. M. Satanova*, A. Raskaliev**

L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

** E-mail for contacts: clever_s.balzhan@mail.ru*

In this work, the diagram of diamond deformation under tension oriented in the direction [111] in the temperature range from 1 to 1700 K is studied in the framework of classical molecular dynamics. The ideal diamond structure is considered, as well as a structure containing a relatively high concentration of defects. To study the elasticity of structures obtained at different temperatures during stretching, anisotropic modeling was performed at atmospheric pressure and the values of deformation and density of the structure over time were calculated. The elasticity of both structures is shown in a wide range of strain values characteristic of each temperature value. It is also shown that a diamond can achieve a plastic state in a narrow range of tensile strength before complete destruction at high temperatures.

Keywords: diamond, diamond films, molecular dynamics, deformation, elasticity.

<https://doi.org/10.52676/1729-7885-2025-4-47-54>

УДК 669.018.258.3:539.26:536.42

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕРМОЦИКЛИРОВАНИЯ И СКОРОСТИ НАГРЕВА НА ПОВЕДЕНИЕ МЕТАЛЛИЧЕСКОГО БЕРИЛЛИЯ В ПАРО-АРГОННОЙ СРЕДЕ МЕТОДОМ ТГА

С. К. Әскербеков¹, Ж. Т. Бугыбай^{1*}, Т. В. Кульсартов^{2,3}, Ж. А. Заурбекова^{2,3},
А. М. Аханов¹, М. Т. Айткулов¹, А. Б. Елишенков², А. А. Шаймерденов¹

¹ РГП «Институт ядерной физики» Агентства РК по атомной энергии, Алматы, Казахстан

² Институт экспериментальной и теоретической физики, КазНУ им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан

³ Филиал «Институт атомной энергии» РГП НЯЦ РК, Курчатов, Казахстан

* E-mail для контактов: zh.bugybay@inp.kz

В настоящей работе исследовано поведение металлического бериллия при высокотемпературной коррозии в условиях термоциклирования в водяной паро-аргонной атмосфере методом термогравиметрического и дифференциального сканирующего калориметрического анализа (TGA/DSC). Эксперименты проводились при трёх скоростях нагрева (10, 20 и 30 К/мин), включающих по два термоцикла (C1 и C2). Окисление оценивалось по приросту массы и тепловым эффектам, а кинетические параметры (E_a , K_0) определялись из логарифмических зависимостей Аррениуса с нормировкой на поверхность и парциальное давление водяного пара. Установлены две характерные температурные области – начальной термоактивации (775–1050 К) и высокотемпературная (975–1170 К), а также переходная зона между ними. Для высокотемпературной области получены значения энергии активации $E_a = 146$ кДж/моль и предэкспоненциального множителя $K_0 = 2,41 \cdot 10^{-1}$ мг/(с·см²·Па). Полученные результаты углубляют понимание механизмов окисления бериллия при термоциклировании и могут быть использованы для оценки безопасности в термоядерных установках.

Ключевые слова: металлический бериллий, термоциклирование, термогравиметрический анализ (TGA), дифференциальная сканирующая калориметрия (DSC), паро-аргонная среда.

ВВЕДЕНИЕ

Бериллий (Be) обладает рядом уникальных физико-механических свойств: высоким модулем упругости, высокой прочностью, относительно низкой плотностью, большой удельной теплоемкостью, высокой теплопроводностью, низким сечением захвата тепловых нейтронов ($9 \cdot 10^{-27}$ см²), высоким коэффициентом рассеяния нейтронов и умеренной радиационной стойкостью. Благодаря этим характеристикам бериллий находит широкое применения в атомной, аэрокосмической и автомобильной промышленности. В ядерных реакторах бериллий может использоваться в качестве замедлителя и отражателя нейтронов [1, 2]. Кроме того, бериллий рассматривается в качестве одного из перспективных материалов для первой стенки термоядерных реакторов, таких как ITER [3–6]. Однако ряд недостатков бериллия и его соединений ограничивает возможность его применения. К основным недостаткам можно отнести высокую химическую активность, что приводит к коррозии материалов при контакте с различными газами, жидкостями и твердыми средами, особенно при высоких температурах, а также радиационное набухание при высоких дозах нейтронного облучения. Если радиационная стойкость бериллия востребована и характерна для не такого широкого его применения, то коррозионная стойкость охватывает более широкое применение бериллия. Исходя из этого, исследования, направленные на объяснение процессов и механизмов коррозии бериллия при взаимодействии с различными составами газов, являются востребован-

ными и позволяют внести вклад в повышении его ресурса и конструкционной надежности.

С 1960-х годов ученые по всему миру начали проводить обширные исследования в этой области. На ранних этапах некоторые исследователи в основном изучали окислительное поведение Be с помощью оптической микроскопии, просвечивающей электронной микроскопии, термогравиметрического анализа и других средств и методик. Они считали, что при более низких температурах на поверхности Be образуется защитный оксидный слой, а его пассивирующая способность уступает только таковой у металлов Al, Ti и Cr, но при более высоких температурах Be подвергается сильному окислению [7, 8]. Например, в работе [9] представлены результаты о начальном механизме взаимодействия Be с O₂ и водяным паром в условиях повышения температуры. Предположено, что в диапазоне температур ~310–790 К первоначальный механизм окисления Be, вызванный взаимодействием с O₂ и парами воды, представляет собой зарождение и рост оксидных островков на поверхности материала. При этом в литературе также отмечаются процессы рекристаллизации бериллия при высокотемпературных воздействиях [10], а также особенности формирования и деградации оксидных плёнок [11].

Большинство исследований сосредоточено на термическом окислительном поведении Be и его начальном окислительном поведении в определенных условиях, в то время как исследований его окислительных характеристик относительно мало. В нашей

предыдущей работе была проведена оценка коррозионной стойкости Be при термоциклировании в паро-аргонной среде при различных температурах, с определением кинетических параметров окисления и выявлением влияния температуры на развитие оксидного слоя [12]. Однако для более детального изучения начальных стадий окисления и уточнения кинетики формирования реакционного слоя при различных режимах термоциклирования в настоящем исследовании дополнительно применены методы термогравиметрического (TGA) и дифференциального сканирующего калориметрического (DSC) анализа. Использование этих методов позволяет получить более полную информацию о массообменных и тепловых эффектах, происходящих в процессе окисления, а также оценить влияние скорости нагрева на кинетические параметры коррозии бериллия.

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Объект исследования

В качестве исследуемых образцов использовались пэбблы металлического бериллия сферической формы с номинальным диаметром $(1,0 \pm 0,2)$ мм и массовой долей бериллия не менее 99%. Всего для исследования было отобрано три партии пэбблов, основные характеристики которых приведены в таблице 1.

Фиксация внешнего вида образцов до и после термообработки осуществлялась с использованием цифровой камеры Canon EOS с объективом Canon EF 100 mm f/2,8L Macro IS USM, обеспечивающим высокую детализацию макросъёмки. Масса образцов измерялась с применением лабораторных электронных весов VIBRA HT-224RCE, обладающих разрешающей способностью 0,0001 г. Данные веса относятся к классу точности «Особый (I)» согласно межгосударственному стандарту OIML R 76-1-2011, что обеспечивает высокую надёжность и повторяемость результатов масс-измерений.

Для точного определения удельной площади поверхности пэбблов была использована программа ImageJ [13], с помощью которой по микрофотографиям определялись реальные геометрические размеры частиц и их разброс. Расчётная площадь согласуется с данными по массе, числу частиц и плотности материала ($\rho = 1,85 \text{ г/см}^3$), а также позволила количественно оценить погрешности, обусловленные вариацией размеров.

Такой подход оказался более надёжным по сравнению с использованием паспортного диаметра, поскольку разброс до $\pm 20\%$ по диаметру мог бы привести к ошибке порядка $\pm 40\%$ в расчётах площади. Корректная оценка площади поверхности критичес-

ки важна для точной нормировки кинетических данных по коррозии.

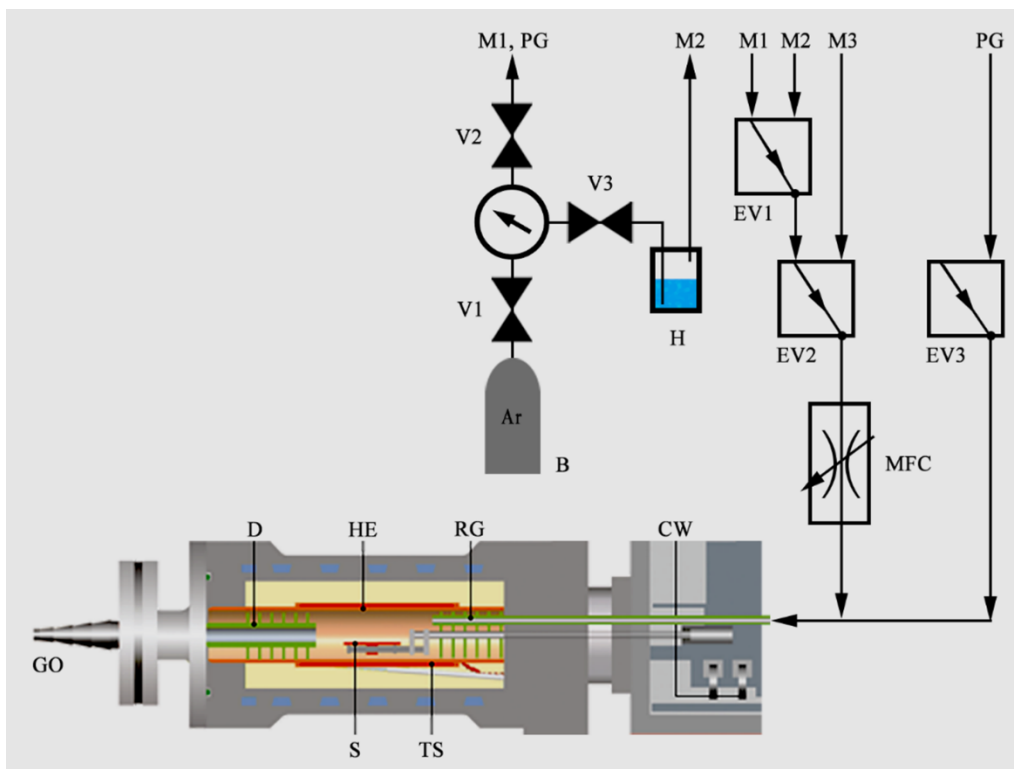
Таблица 1. Основные характеристики исследуемых образцов

Партия	Кол-во, шт.	Масса, мг	Общая площадь поверхности, см ²
1	89	$88,1 \pm 0,1$	$2,82 \pm 0,025$
2	84	$92,3 \pm 0,2$	$2,90 \pm 0,032$
3	84	$87,1 \pm 0,1$	$2,77 \pm 0,013$

Описание метода и экспериментальной установки

Коррозионные эксперименты проводились с использованием синхронного термоаналитического комплекса TGA/DSC 3+ (Mettler Toledo), обладающего высокой чувствительностью по массе ($\pm 0,1 \text{ мкг}$) и тепловому потоку. Перед проведением экспериментов проводилась калибровка весов с использованием эталонных калибровочных гирь, а также калибровка DSC по температуре и тепловому отклику с применением стандартных материалов (индий, цинк, алюминий, золото, палладий).

Сущность метода заключалась в регистрации изменения массы образца при линейном нагреве в контролируемой газовой атмосфере. Эксперимент проводился в условиях программируемого термоциклирования с различными скоростями нагрева ($\beta = 10, 20$ и 30 К/мин). Выбранные скорости нагрева соответствуют стандартному диапазону кинетических TGA-исследований и позволяют проследить различие между поверхностно-ограниченными и диффузионно-контролируемыми режимами. Кроме того, такие значения могут рассматриваться как модельные для быстрых термопереходов, характерных для эксплуатационных и аварийных сценариев, сохраняя при этом корректность температурной однородности образца. На рисунке 1 представлена принципиальная схема установки на базе TGA-DSC 3+. Исходный инертный газ – аргон высокой чистоты (99,9999%, баллон В) – увлажнялся до относительной влажности 95% (парциальное давление $\sim 2100 \text{ Па}$) в увлажнителе (Н), эффективность которого и воспроизводимость режима ранее были подтверждены экспериментально [14]. Применяемая газовая схема позволяла гибко управлять составом реакционной среды, расходом газа и температурным режимом, обеспечивая воспроизводимость условий проведения коррозионных испытаний. Установка обеспечивала стабильную подачу влажного аргона в зону реакции и одновременно регистрировала изменение массы образца с высокой чувствительностью.



В – баллон с аргонном; Н – увлажнитель; V1–V3, EV1–EV3 – запорные и управляющие клапаны; M1–M3 – подключение газовых линий (направления потоков); PG – линия подачи газа продувки; RG – ввод реакционного газа, D – дефлектор, MFC – регулятор массового расхода газа; HE – нагревательный элемент; TS – датчик температуры печи (термопара); S – держатель образца; GO – вывод газа; CW – калибровочные гири

Рисунок 1. Принципиальная схема экспериментальной установки

Образцы загружались в тигель объемом 900 мкл одним равномерным слоем, обеспечивающим максимальный контакт с реакционной атмосферой при минимальном перекрытии поверхности пэбблов. Такой способ укладки позволял сохранить однородность условий коррозии и обеспечить корректную термогравиметрическую регистрацию массы.

Процедура экспериментов

Процедура коррозионных экспериментов включала следующие этапы:

- 1) Фиксация исходного внешнего вида образцов (фотографирование).
- 2) Измерение начальной массы образцов.
- 3) Размещение образцов в тигле в зоне нагрева печи.
- 4) Организация постоянного потока паро-аргона на уровне 50 мл/мин.
- 5) Линейный нагрев образцов со скоростью 10 К/мин до температуры стабилизации 373 К далее изотермическая выдержка в течении 60 мин.
- 6) Линейный нагрев со скоростью 10/20/30 К/мин до целевой температуры 1173 К, далее изотермическая выдержка в течение 5 мин.
- 7) Охлаждение образцов со скоростью 40 К/мин при постоянной продувке паро-аргоном с расходом 50 мл/мин.

8) Инспекция внешнего вида образцов и взвешивание.

9) Фиксация внешнего вида образцов (фотографирование).

Всего было проведено девять экспериментов, включая контрольный (бланковый), с выполнением двух термоциклов (C1 и C2) для каждой из трёх партий пэбблов (таблица 2).

Таблица 2. Порядок и объем работ

Партия	Тип экспериментов	Бланк	C1	C2
1	10 К/мин	1	2	3
2	20 К/мин	4	5	6
3	30 К/мин	7	8	9

Все представленные экспериментальные результаты получены с учётом бланкового сигнала, что позволяет исключить вклад посторонних факторов и сконцентрироваться на чистом эффекте взаимодействия водяного пара с образцами металлического бериллия. Полученные бланковые кривые продемонстрировали хорошую воспроизводимость, что подтверждает надёжность применённой методики. Разработанный подход может быть эффективно использован для последующего анализа новых материалов, включая бериллиды, в рамках текущих и планируемых проектов исследовательской группы.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕРМОЦИКЛИРОВАНИЯ И СКОРОСТИ НАГРЕВА НА ПОВЕДЕНИЕ МЕТАЛЛИЧЕСКОГО БЕРИЛЛИЯ В ПАРО-АРГОННОЙ СРЕДЕ МЕТОДОМ ТГА

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Макроскопические изменения внешнего вида пэбблов после термообработки при различных скоростях нагрева представлены в таблице 3. В данной серии экспериментов толщина оксидного слоя в пэбблах специально не оценивалась. Основным параметром взаимодействия служил прирост массы, так как методологически работа была ориентирована на неразрушающий анализ и последовательные циклы на одних и тех же образцах. Расчётные или прямые измерения толщины оксида будут предметом отдельных исследований с использованием микроскопии поперечных сечений.

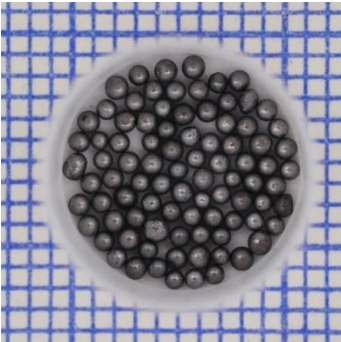
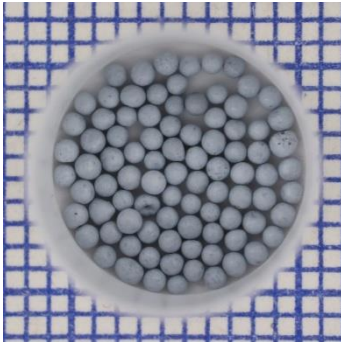
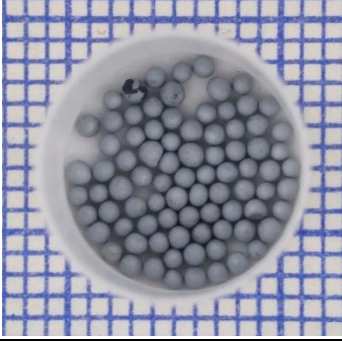
В исходном состоянии пэбблы металлического бериллия имеют равномерную тёмно-серую металлическую поверхность с характерным блеском, типичным для чистого металла. Отдельные образцы демонстрируют матовые участки, предположительно связанные с локальным отшелушиванием поверхностного слоя или начальной стадией окисления при хранении.

После термообработки до стадии С1 во всех сериях наблюдается изменение цвета поверхности на светло-серый. Это свидетельствует о формировании оксидной плёнки. Данный эффект прослеживается при всех исследованных скоростях нагрева.

После прохождения стадии С2, поверхность становится ещё более светлой и равномерно матовой. Это указывает на утолщение оксидного слоя. При более высоких скоростях нагрева визуальные отличия между стадиями С1 и С2 становятся более выраженными, вероятно из-за интенсивности прогрева и быстрого изменения реакционных условий.

Следует отметить, что в некоторых партиях образцов наблюдались различия в окраске между отдельными зонами одного тигля, что может быть обусловлено их случайным переворачиванием при переносе между этапами характеристики. Это может косвенно указывать на влияние ориентации пэбблов в тигле на характер оксидирования, особенно при наличии градиентов температуры или паровой концентрации в реакционной зоне.

Таблица 3. Макроскопические изменения образцов при термообработке с разной скоростью нагрева

β	Исходный вид	После С1	После С2
10 К/мин			
20 К/мин			
30 К/мин			

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕРМОЦИКЛИРОВАНИЯ И СКОРОСТИ НАГРЕВА НА ПОВЕДЕНИЕ МЕТАЛЛИЧЕСКОГО БЕРИЛЛИЯ В ПАРО-АРГОННОЙ СРЕДЕ МЕТОДОМ ТГА

Данные, представленные в таблице 4, показывают, что с увеличением скорости нагрева суммарный прирост массы образцов последовательно снижается. Это связано с тем, что при более высоких скоростях времени на протекание реакции между бериллием и паром недостаточно.

Таблица 4. Дефект массы образцов после каждого цикла

β , К/мин	После C1		После C2	
	$\Delta m_{\max C1}$, мг	$\Delta m_{\max C1}/m_0$, %	$\Delta m_{\max C2}$, мг	$\Delta m_{\max C2} /$ $(m_0 + \Delta m_{\max C1})$, %
10	$0,183 \pm 0,010$	$0,21 \pm 0,01$	$0,211 \pm 0,012$	$0,24 \pm 0,01$
20	$0,098 \pm 0,006$	$0,11 \pm 0,01$	$0,111 \pm 0,007$	$0,12 \pm 0,01$
30	$0,070 \pm 0,005$	$0,08 \pm 0,01$	$0,084 \pm 0,006$	$0,10 \pm 0,01$

Несмотря на то, что после C1 поверхность образцов уже существенно изменяется – наблюдается развитие оксидного слоя, – C2 демонстрирует сходную динамику массонарастания, что позволяет заключить: изменение морфологии поверхности после C1

не оказывает существенного влияния на механизмы дальнейшего окисления.

Таким образом, оба термоцикла вносят сопоставимый вклад в коррозионный процесс, а влияние скорости нагрева проявляется преимущественно через кинетические ограничения реакции.

На рисунке 2 представлены результаты TGA и DSC анализа, выполненного согласно процедуре эксперимента, отдельно по стадиям C1 и C2, а также в виде сводных зависимостей изменения скорости коррозии (da/dt) от температуры. Кривые DSC в настоящей работе использовались в качестве качественного индикатора термоактивации и общих тенденций, без количественного расчёта энтальпий. Такой выбор объясняется наложением нескольких параллельных процессов и нестабильностью базовой линии в увлажнённой атмосфере, в то время как основной акцент был сделан на TGA-данных, обладающих большей воспроизводимостью.

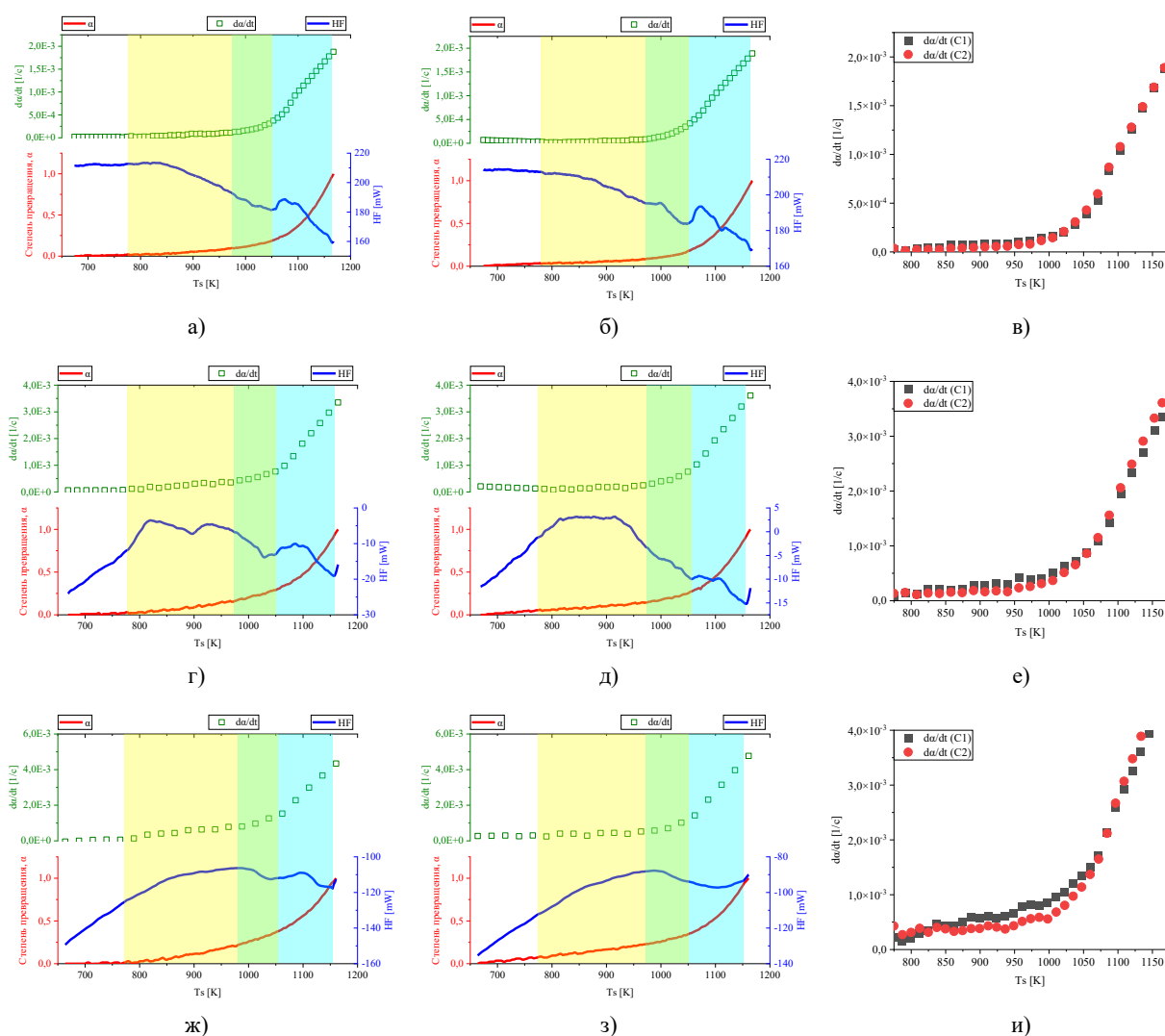


Рисунок 2. Результаты TGA/DSC-анализа на стадиях (10, 20, 30 К/мин) и суммарно при разных β : (а, г, ж) – C1, (б, д, з) – C2, (в, е, и) – сводные данные по da/dt

Кроме того, корректная квантификация DSC-пи-ков обычно требует экспериментов с одним пэбблом, тогда как для повышения качества TGA-кривых в данной серии использовался набор пэбблов.

С увеличением скорости нагрева тепловые эффекты, зарегистрированные по данным DSC, становятся всё более отрицательными, что свидетельствует о выраженной экзотермической природе реакции уже на ранних стадиях. Это может указывать на смещение основного теплового пика к более низким температурам и ускорение окислительных процессов при более интенсивном нагреве.

Одновременно прирост массы становится заметным уже в низкотемпературной области, особенно при $\beta = 30$ К/мин, что также подтверждает более ранний запуск реакции и уменьшение температурного запаздывания. В отличие от этого, при $\beta = 10$ К/мин массонакопление начинается позже, что связано с более плавным прогревом и постепенным развитием оксидного слоя.

Сводные данные на рисунке 2 (в, е, и) демонстрируют, что, несмотря на различия в деталях термограмм и интенсивности протекающих процессов, основные механизмы взаимодействия металлического бериллия с водяным паром сохраняются на обеих термоциклических стадиях (C1 и C2). Это обоснованно позволяет рассматривать их в рамках объединённого кинетического анализа, что, в свою очередь, способствует снижению методических погрешностей и повышению надёжности полученных параметров. Данный вывод также подтверждается согласованностью с данными по массовому приросту, представленными в таблице 4.

Таким образом, температурный диапазон реакции условно можно разделить на три характерные зоны:

1) Область начальной термоактивации (НТ) (от 775 до 1050 К, выделена жёлтым) – характеризуется медленной скоростью окисления и формированием первичного оксидного слоя.

2) Переходная область (от ~950 до 1070 К, зелёная) – представляет собой интервал, в котором происходит наложение двух режимов окисления. Здесь наблюдаются резкие изменения как в тепловых эффектах, так и в темпах прироста массы.

3) Высокотемпературная область (ВТ) (от 975 до 1170 К, выделена синим) – в этом диапазоне реакции становятся интенсивными и хорошо воспроизводимыми.

Подтверждение характера этих изменений требует дополнительных структурных и фазовых исследований; в дальнейших планах предусмотрено проведение отдельных серий экспериментов для НТ- и ВТ-зон с применением микроструктурного анализа.

Кинетический анализ

Для описания скорости высокотемпературной коррозии металлического бериллия в атмосфере водяного пара применён подход, основанный на уравнении Аррениуса в логарифмической форме:

$$\log K = \log \left(\frac{m_{\max} - m_0}{S \cdot P} \cdot \frac{d\alpha}{dt} \right) = \log K_0 - \frac{E_a}{2,303 \cdot R \cdot T}$$

где: da/dt – скорость превращения (1/с); a – степень превращения: $a = (m(t) - m_0)/(m_{\max} - m_0)$; S – площадь поверхности образцов (см²); P – давление водяного пара (Па); K_0 – предэкспоненциальный множитель (мг/(с·см²·Па)); E_a – энергия активации (кДж/моль); R – универсальная газовая постоянная (8,314 Дж/моль·К); T – температура (К).

Для расчёта кинетических параметров использованы значения $\log K$ и $1000/T$, полученные из TGA-данных при трёх различных скоростях нагрева. Расчёты проводились по объединённым и усреднённым значениям для двух термоциклов (C1 и C2).

Аппроксимация линейных участков графиков $\log K$ и $1000/T$ позволила определить значения E_a и K_0 по угловому коэффициенту и пересечению прямой с осью ординат соответственно. Расчёты нормированы на поверхность и давление, что обеспечивает корректное сравнение между экспериментами.

Полученные значения кинетических параметров представлены в таблицах выше и использовались для сравнительного анализа влияния температурных режимов (скоростей нагрева) на реакционную способность металлического бериллия в паро-аргонной атмосфере.

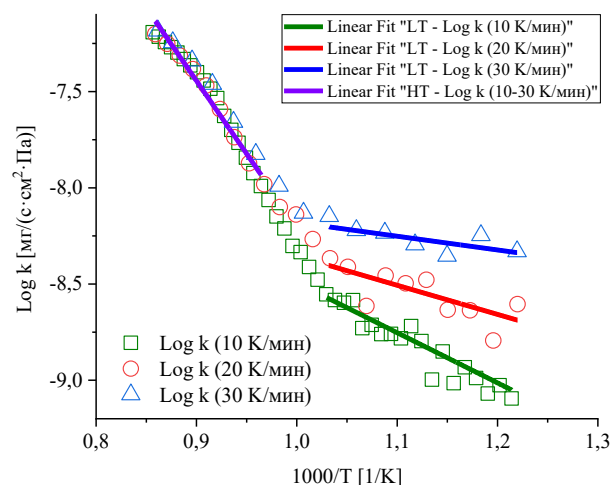


Рисунок 3. Зависимость $\log K$ от $1/T$ для расчёта E_a и K_0

Полученные кинетические параметры показывают качественное разделение двух температурных режимов процесса коррозии:

1) В ВТ области значения энергии активации ($E_a = 146$ кДж/моль) и предэкспоненциального множителя ($K_0 = 0,241$ мг/(с·см²·Па)) находятся в хорошем согласии с предыдущими экспериментами, выполненными в схожей температурной области. Расхождения находятся в пределах ожидаемой экспериментальной ошибки, что подтверждает воспроизводимость данных и достоверность модели.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕРМОЦИКЛИРОВАНИЯ И СКОРОСТИ НАГРЕВА НА ПОВЕДЕНИЕ МЕТАЛЛИЧЕСКОГО БЕРИЛЛИЯ В ПАРО-АРГОННОЙ СРЕДЕ МЕТОДОМ ТГА

Таблица 5. Сравнение кинетических параметров в НТ и ВТ областях

Этапы	ВТ (объединённые)		НТ (по скоростям)		
	10–30 К/мин	Литература [12]	10 К/мин	20 К/мин	30 К/мин
K_0 , мг/(с · см ² · Па)	$(2,41 \pm 0,48) \cdot 10^{-1}$	$2,30 \cdot 10^{-1}$	$(1,30 \pm 0,26) \cdot 10^{-6}$	$(1,44 \pm 0,29) \cdot 10^{-7}$	$(3,42 \pm 0,68) \cdot 10^{-8}$
E_a , кДж/моль	146 ± 15	130	50 ± 5	29 ± 3	14 ± 1

2) В НТ области наблюдается значительное снижение как E_a , так и K_0 , причём с заметной зависимостью от скорости нагрева. Это отражает более сложные механизмы и возможное влияние диффузионных ограничений или образования защитной оксидной плёнки на ранних стадиях.

Таким образом, можно утверждать, что высокотемпературный режим стабилен и хорошо воспроизводим, тогда как низкотемпературный процесс требует более детального анализа с учётом начальных стадий формирования оксидной фазы.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе настоящего исследования была проведена оценка коррозионной стойкости металлического бериллия при термоциклическом воздействии в водяной паро-аргонной среде с использованием термogravиметрического и калориметрического анализа. Методически были реализованы два последовательно повторяемых термоцикла (C1 и C2) при различных скоростях нагрева (10, 20 и 30 К/мин), что позволило изучить как начальные стадии окисления, так и развитие реакционного слоя. На основании аппроксимации логарифмических зависимостей константы скорости от температуры в координатах Аррениуса были определены кинетические параметры двух характерных температурных диапазонов: НТ и ВТ областей. Установлено, что в области ВТ параметры хорошо согласуются с результатами предыдущих исследований, а различия в НТ зоне обусловлены повышенной чувствительностью ранних стадий окисления к экспериментальным условиям. Разделение температурного интервала на характерные зоны (НТ, ВТ, переходная) позволяет более точно описывать процессы окисления бериллия и формировать базу для верификации моделей коррозии в условиях аварийной эксплуатации.

Финансирование

Данное исследование было профинансировано Комитетом науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (No. BR24993119 «Характеризация перспективных материалов бланкета термоядерного реактора»).

ЛИТЕРАТУРА / REFERENCES

1. Nakamichi M. [et. al.]. Beryllium and its Alloys as Neutron Multiplying Materials // Elsevier, 2020. – P. 203–250.
2. Chandler D. [et. al.]. Nuclear Transmutations in HFIR's Beryllium Reflector and Their Impact on Reactor Operation and Reflector Disposal // Nuclear Technology, 2012. – Vol. 177, No. 3. – P. 395–412.
3. Federici G. [et. al.]. Beryllium as a Plasma-Facing Material for Near-Term Fusion Devices // Elsevier, 2012. – P. 621–666.
4. Longhurst G. R. [et. al.]. Managing Beryllium in Nuclear Facility Applications // Nuclear Technology, 2011. – Vol. 176, No. 3. – P. 430–441.
5. Kurosaki K. [et. al.]. Neutron Reflector Materials (Be, Hydrides) // Elsevier, 2020. – P. 382–399.
6. Smolik G. [et. al.]. Implications of Beryllium: Steam Interactions in Fusion Reactors // Journal of Nuclear Materials, 1992. – P. 153–157.
7. Gulbransen E. A. [et. al.]. The kinetics of the reactions of beryllium with oxygen and nitrogen and the effect of oxide and nitride films on its vapor pressure // Journal of the Electrochemical Society, 1950. – Vol. 11, No. 97. – P. 383–395.
8. Jepson W B. [et. al.]. The high temperature oxidation of beryllium and the fate of beryllium carbide inclusions // Journal of Nuclear Materials, 1963. – Vol. 2, No. 10. – P. 127–133.
9. Zalkind S. [et. al.]. The initial interactions of beryllium with Oz and H2O vapor at elevated temperatures // Surface Science, 2007. – Vol. 5, No. 601. – P. 1326–1332.
10. Papirov I.I. [et. al.] Recrystallization of beryllium // Bulletin of Kharkiv National University. Ser. Physics, 2010. – Vol. 808, Issue 2. –P. 11–24.
11. Davydov D.A. [et. al.] Formation and degradation of oxide films on beryllium // Problems of Atomic Science and Technology. Series Thermonuclear Fusion, 2010. – Vol. 33, Issue 2. – P. 39–49.
12. Akhanov A. [et. al.] Study of corrosion resistance of metal beryllium during thermocycling in vapour-argon conditions // Recent Contributions to Physics, 2024. – Vol. 90(3). – P. 57–63.
13. Schneider C. A. [et. al.]. NIH Image to ImageJ: 25 years of image analysis // Nature Methods, 2012. – Vol. 9, No. 7. – P. 671–675.
14. Kulsartov T. [et al.]. Comparative analysis of high-temperature corrosion processes of beryllides of different compositions // Fusion Engineering and Design, 2025. – Vol. 219. – P. 115283.

ТГА ӘДІСІМЕН БУ-АРГОН ОРТАСЫНДАҒЫ МЕТАЛЛ БЕРИЛЛИЙДІҢ ӘРЕКЕТІНЕ
ТЕРМОЦИКЛДЕУ МЕН ҚЫЗДЫРУ ЖЫЛДАМДЫҒЫНЫҢ ӘСЕРІН ЗЕРТТЕУ

С. Қ. Әскербеков¹, Ж. Т. Бұғыбай^{1*}, Т. В. Кульсартов^{2,3}, Ж. А. Заурбекова^{2,3},
А. М. Аханов¹, М. Т. Айтқұлов¹, А. Б. Елишенков², А. А. Шаймерденов¹

¹ ҚР Атом энергиясы жөніндегі агенттігінің «Ядролық физика институты» РМК, Алматы, Қазақстан

² Әл-Фараби атындағы ҚазҰУ Эксперименттік және теориялық физика институты, Алматы, Қазақстан

³ ҚР ҰЯО РМК «Атом энергиясы институты» филиалы, Курчатов, Қазақстан

* Байланыс үшін E-mail: zh.bugybay@inp.kz

Бұл жұмыста термогравиметриялық және дифференциалды сканерлеу калориметриялық талдау (TGA/DSC) әдісімен су бу-аргон атмосферасында термоциклдеу жағдайында жоғары температуралы коррозиядағы металл бериллийдің әрекеті зерттелді. Тәжірибелер екі жылу циклін (C1 және C2) қамтитын үш қыздыру жылдамдығында (10, 20 және 30 К/мин) жүргізілді. Тотығу массаның өсуі мен жылу әсерімен бағаланды, ал кинетикалық параметрлер (E_a , K_0) аррениустың логарифмдік тәуелділіктерінен су буының беткі қабаты мен парциалды қысымымен анықталды. Температураның екі мәніне тән аймағы белгіленді: бастапқы термоактивация (775–1050 К) және жоғары температура (975–1170 К), сондай-ақ олардың арасындағы өтпелі аймақ. Жоғары температура аймағы үшін активтену энергиясының мәндері $E_a = 146$ кДж/моль және экспоненциалды фактор $K_0 = 2,41 \cdot 10^{-1}$ мг/(с·см²·Па) алынды.

Түйін сөздер: металл бериллий, термиялық цикл, термогравиметриялық талдау (TGA), дифференциалды сканерлеу калориметриясы (DSC), бу-аргон ортасы.

STUDY OF THE EFFECT OF THERMAL CYCLING AND HEATING RATE ON THE BEHAVIOR
OF METALLIC BERYLLIUM IN A VAPOR-ARGON ENVIRONMENT BY THE TGA METHOD

S. K. Askerbekov¹, Zh. T. Bugybay^{1*}, T. V. Kulsartov^{2,3}, Zh. A. Zaurbekova^{2,3},
A. M. Akhanov¹, M. T. Aitkulov¹, A. B. Yelishenkov², A. A. Shaimerdenov¹

¹ RSE “Institute of Nuclear Physics” of the Agency of the Republic of Kazakhstan for Atomic Energy, Almaty, Kazakhstan

² Institute of Experimental and Theoretical Physics, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan

³ Branch “Institute of Atomic Energy” RSE NNC RK, Kurchatov, Kazakhstan

* E-mail for contacts: zh.bugybay@inp.kz

This study investigates the behaviour of metallic beryllium under high-temperature corrosion in a water-steam-argon atmosphere under thermal cycling conditions using thermogravimetric and differential scanning calorimetric analysis (TGA/DSC). The experiments were conducted at three heating rates (10, 20, and 30 K/min), each including two thermal cycles (C1 and C2). Oxidation was evaluated by mass gain and thermal effects, and kinetic parameters (E_a , K_0) were determined from logarithmic Arrhenius dependencies with normalisation to surface area and partial water vapour pressure. Two characteristic temperature ranges were established: initial thermal activation (775–1050 K) and high temperature (975–1170 K), as well as a transition zone between them. For the high-temperature region, the activation energy $E_a = 146$ kJ/mol and the pre-exponential factor $K_0 = 2.41 \cdot 10^{-1}$ mg/(s·cm²·Pa) were obtained. The results obtained deepen the understanding of the mechanisms of beryllium oxidation during thermal cycling and can be used to assess safety in nuclear fusion installations.

Keywords: metallic beryllium, thermal cycling, thermogravimetric analysis (TGA), differential scanning calorimetry (DSC), vapor-argon environment.

<https://doi.org/10.52676/1729-7885-2025-4-55-64>

УДК 621.039.4:536.2:004.94

РАЗРАБОТКА И АНАЛИЗ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ОБЛУЧАТЕЛЬНОЙ КАПСУЛЫ, ПРЕДНАЗНАЧЕННОЙ ДЛЯ ПРОИЗВОДСТВА МО-99 В РЕАКТОРЕ ВВР-К

А. Ч. Ашибаев*, Д. С. Сайранбаев, А. А. Шаймерденов

РГП «Институт ядерной физики» Агентства Республики Казахстан по атомной энергии, Алматы, Казахстан

** E-mail для контактов: ashibayev@inp.kz*

В настоящей работе представлены результаты теплофизического анализа конструкции облучательной капсулы, предназначенной для повышения удельной активности ^{99}Mo в исследовательском реакторе ВВР-К. Численное моделирование было проведено в программном комплексе ANSYS Fluent 2021 R2 для трёх предложенных конфигураций активной зоны. Показано, что разработанная конструкция облучательного устройства обеспечивает надёжный тепловой режим при максимальной температуре порошка триоксида молибдена, равной $152,6^\circ\text{C}$, и температуре теплоносителя, не превышающей $50,1^\circ\text{C}$. Результаты подтверждают безопасность эксплуатации облучательного устройства на реакторе ВВР-К как в бериллиевой ловушке в центре активной зоны, так и в штатной высокопоточной ячейке.

Ключевые слова: исследовательский реактор, молибден-99, облучательное устройство, тепловой режим, теплофизическая модель.

ВВЕДЕНИЕ

Более 80% ядерно-диагностических процедур в мире основаны на применении метастабильного изотопа технеция-99m ($^{99\text{m}}\text{Tc}$), обладающего рядом преимуществ по сравнению с другими радионуклидами, используемыми в производстве радиоактивных фармацевтических препаратов [1]. Метастабильное состояние технеция образуется с абсолютной интенсивностью 89 % в результате β^- -распада молибдена-99 и имеет период полураспада, равный 6,01 часам. На исследовательских реакторах получение ^{99}Mo осуществляется преимущественно двумя методами: осколочным и нейтронно-активационным. Второй метод реализуется, начиная с 1998 года, на базе исследовательского реактора ВВР-К путём облучения 10 г порошка триоксида молибдена MoO_3 в штатной облучательной капсуле, которая находится в центральной облучательной позиции одного из центральных облучательных каналов (ОК) активной зоны (АЗ) реактора ВВР-К. Конечная удельная активность Mo-99 , получаемая в вышеописанных условиях, равна $(2,3 \pm 0,3)$ Ки/г [2]. Одним из эффективных методов увеличения удельной активности ^{99}Mo является увеличение доли эпитепловых нейтронов в общем нейтронном спектре, поскольку сечение реакции $^{98}\text{Mo}(n,\gamma)^{99}\text{Mo}$ возрастает с 0,13 барн для тепловых нейтронов до 6,7 барн при облучении молибденовой мишени эпитепловыми нейтронами [3]. Практически данный метод реализуется путём разработки конструкции облучательного устройства (ОУ) и/или модернизации компоновки АЗ. Подобные работы были выполнены, к примеру, на исследовательских реакторах ИРТ-Т и IEA-R1 [4, 5], которые находятся в городах Томск (Россия) и Сан-Паулу (Бразилия) соответственно. В обоих случаях было предложено установить в центре АЗ бериллиевый замедлитель, внутри которого размещается молибденовая мишень. Подобное нововведение позволяет, в случае реактора ИРТ-Т повысить удельную активность ^{99}Mo с 1 Ки/г для штатного облучения до 3,4 Ки/г, а в случае реактора IEA-R1 с 1,1 Ки/г до 1,2 Ки/г. Малый при-

рост в 2% во втором случае объясняется малой толщиной бериллия и его окружении тепловыделяющими сборками с преимущественно быстрым потоком нейтронов, что указывает о необходимости разработки конструкции ОУ совместно с изменением конфигураций АЗ реактора ВВР-К. В ходе анализа литературного обзора и проведения нейтронно-физических расчётов [6] было разработано ОУ, представленное на рисунке 1 и рассмотрены две модифицированные конфигурации АЗ реактора ВВР-К, представленные на рисунке 2.

В соответствии с вышесказанным, цель настоящей работы заключается в исследовании теплофизических условий эксплуатации разработанного ОУ в различных конфигурациях АЗ исследовательского реактора ВВР-К. Это позволит оценить допустимые температурные режимы и подтвердить возможность безопасной эксплуатации ОУ.

МЕТОДЫ

Теплофизический расчёт в данной работе был проведён в программном комплексе ANSYS Fluent 2021 R2, который предназначен для численного решения дифференциальных уравнений тепло- и массопереноса, гидродинамики и многокомпонентных течений. ANSYS Fluent основан на методе конечных объёмов, суть которого заключается в разбиении расчётной модели на совокупность контрольных объёмов. Для каждого из них формируется система алгебраических уравнений, решая которую можно определить различные параметры системы. Численное моделирование теплообмена в ANSYS Fluent основано на решении уравнения энергии, которое включает в себя механизмы теплопроводности, конвективного теплообмена и лучистого теплообмена. Теплопроводность учитывает перенос тепла внутри тел за счёт молекулярной диффузии, конвекция – перенос тепла за счёт движения жидкости, а теплообмен излучением подразумевает испускание нагретыми телами фотонного излучения.

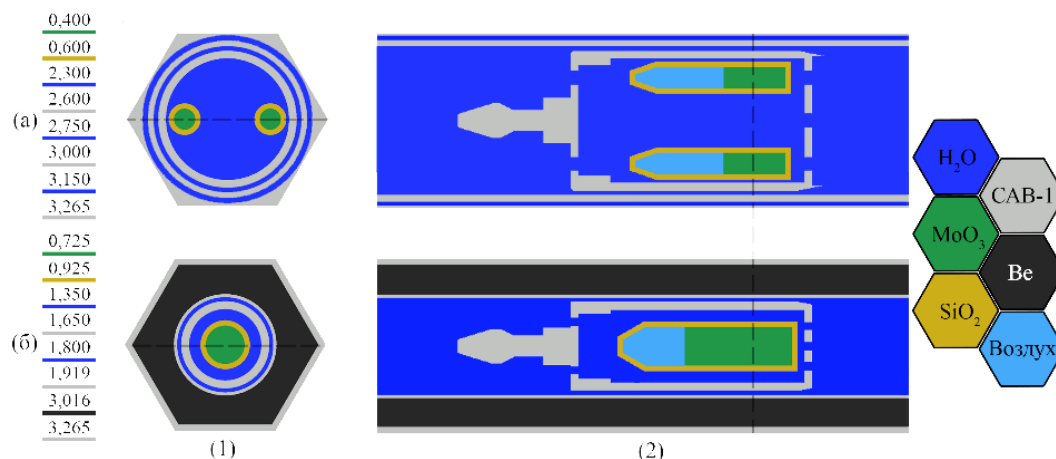


Рисунок 1. Горизонтальные (1) и вертикальные (2) разрезы штатной облучательной капсулы (а) и ОУ (б). Перечень чисел обозначает радиусы окружностей (для шестигранников – радиусы вписанных окружностей), измеренные от центра соответствующих моделей (за исключением образцов в штатном пенале). Все значения приведены в сантиметрах. Пунктирные линии каждой из плоскостей разрезов указывают на соответствующие плоскости перпендикулярных разрезов

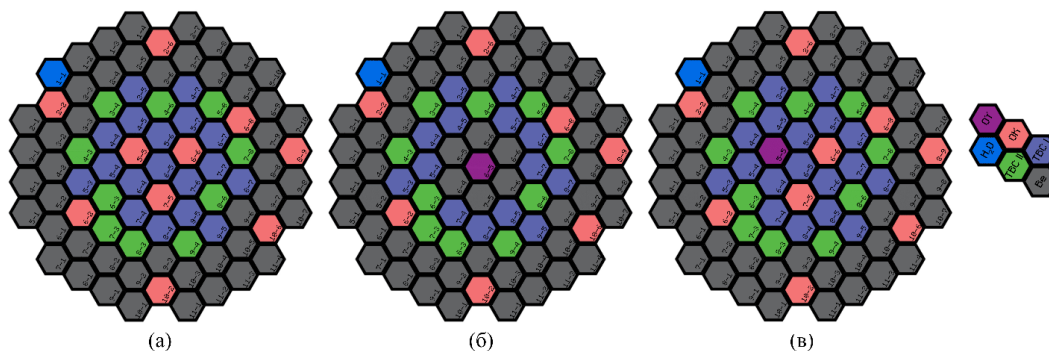


Рисунок 2. Стандартная (а), модернизированная с бериллиевой ловушкой вокруг ОУ в ячейке 6-5 (б) и модернизированная АЗ с ОУ в ячейке 5-5 (в)

Теплофизическое моделирование выполнялось в три этапа: тестовом, верификационном и основном. В рамках тестового этапа был проведён теплофизический расчёт эталонной модели колена трубопровода, представленного в официальном руководстве ANSYS Fluent [7] и показанного на рисунке 3. Модель описывает трёхмерное турбулентное течение и теплообмен в смесительном участке трубопровода. С целью снижения вычислительной нагрузки расчётная модель была усечена по плоскости симметрии, так как течение симметрично относительно центральной оси. Геометрия модели включает две области впуска (velocity inlet) и одну область выпуска (pressure outlet) жидкости, в качестве которой выступает вода. Первый впускной участок соответствует основному, относительно холодному, потоку с температурой 20 °С и скоростью 40 см/с по оси u . Вторая область впуска, расположенная на изгибе трубы, соответствует относительно горячему потоку с температурой 40 °С и скоростью 120 см/с по оси u . Манометрическое давление в выпускной области было принято равным нулю. Стенки трубопровода моделировались как адиабатические и непроницаемые

(no-slip wall). Для моделирования турбулентного течения жидкости была применена стандартная модель турбулентности $k-\epsilon$ с использованием усовершенствованного метода учёта пристенного слоя (enhanced wall treatment, EWT).

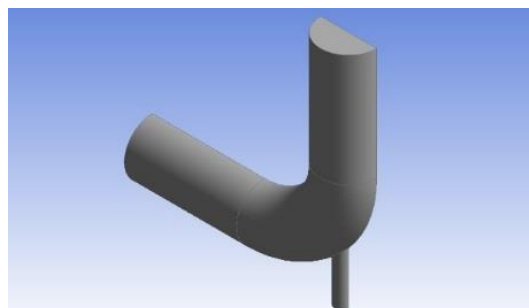


Рисунок 3. Изометрический вид модели колена трубопровода из официального руководства ANSYS Fluent [7]

На втором, верификационном этапе был выполнен теплофизический анализ облучательной капсулы, представленной на рисунке 4. Рассматриваемая модель описывает конструкцию облучательного ка-

нала, внутри которого размещена модифицированная штатная капсула. Её конструктивное отличие от стандартной заключается в изменённом расположении отверстий, предназначенных для циркуляции теплоносителя первого контура реактора ВВР-К. В верхней части алюминиевой капсулы предусмотрены три отверстия, организованные в форму равностороннего треугольника. В нижней части капсулы расположено одно центральное отверстие. Специфическая конфигурация отверстий обусловлена расположением содержимого капсулы: в капсулу размещаются три алюминиевые субкапсулы, ориентированные аналогично верхним отверстиям капсулы в треугольной форме, но с угловым смещением 60° относительно центра облучательного канала.

Две субкапсулы содержат по 10, сложенных друг на друга, пластин бериллида титана Be_{12}Ti , каждая из которых имеет размер $8,5 \times 8 \times 1,5$ мм. Третья субкапсула заполнена металлическим бериллием в виде пзбблов общей массой 5 г и высотой засыпки 15 мм. Все субкапсулы герметизированы в атмосфере аргона при атмосферном давлении. Расчёт энерговыделения в материалах осуществлялся для конфигурации с размещением ОУ в первой позиции ячейки 5-5 реактора ВВР-К [8]. Значения энерговыделения компонентов верификационной модели представлены в таблице 1.

Скорость теплоносителя в области впуска была принята равной 0,1 см/с, что обусловлено особенностями геометрии алюминиевой капсулы. В связи с этим было использовано приближение Буссинеска с заданием коэффициента теплового расширения, соответствующего нормальным условиям и взятого из базы данных Fluent. В рамках численного расчёта вышеописанной модели были рассмотрены два режима течения теплоносителя: ламинарный и турбулентный. Последний был описан с использованием реализуемой модели турбулентности $k-\varepsilon$.

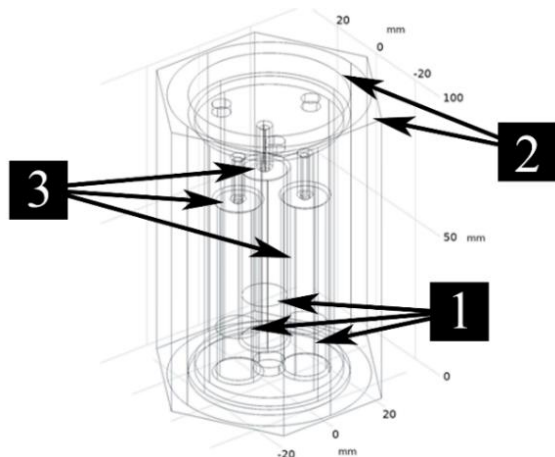


Рисунок 4. Трёхмерная модель модифицированной штатной капсулы (2) с тремя алюминиевыми субкапсулами (3), с образцами Be_{12}Ti и Be (1) в программном комплексе COMSOL Multiphysics [8]

Таблица 1. Энерговыделения компонентов верификационной модели [8]

Компонента	Энерговыделение, Вт	Удельное энерговыделение, Вт/г
Облучательная капсула	118,8	1,65
Алюминиевая субкапсула с Be	15,1	1,55
Образцы Be	6,3	1,26
Алюминиевая субкапсула с Be_{12}Ti (1)	15,4	1,58
Образцы Be_{12}Ti (1)	3,0	1,28
Алюминиевая субкапсула с Be_{12}Ti (2)	15,4	1,58
Образцы Be_{12}Ti (2)	3,0	1,29

Геометрическая сетка модели была сформирована с размером элемента 0,05 см. С включённой адаптивной регулировкой размеров элементов общее количество элементов составило 28203204. Максимальные коэффициенты вытянутости и искривлённости составили 11,09 и 0,85 соответственно, минимальное ортогональное качество было равно 0,15. Указанные характеристики сетки являются наиболее информативными критериями оценки качества сетки. На основе вышеизложенных значений можно сделать вывод, что все значения находятся в пределах рекомендованных диапазонов, приведённых в руководстве ANSYS Fluent [7], при этом относительно большая вытянутость элементов объясняется вытянутостью модели вдоль одной из осей (по высоте).

Во время основного этапа были построены трёхмерные модели штатного облучательного канала и ОУ, изображённые на рисунке 5. С целью снижения вычислительных затрат расчётная модель была усечена по высоте: область расчёта включает сегмент, охватывающий +3 см от головки капсулы вверх и -3 см от его нижнего основания. Теплоотвод в модели реализуется за счёт циркуляции теплоносителя первого контура, который в виде fluid-объекта обтекает капсулу, а также внутреннюю и внешнюю конструкции облучательного канала. В горизонтальном сечении модель охватывает одну ячейку АЗ реактора. Принятое геометрическое допущение обосновано минимальным теплообменом между ячейками АЗ вследствие эффективной термической экранировки, обеспечиваемой постоянным потоком воды за счёт главных циркуляционных насосов реактора ВВР-К.

Сеточная модель для ОУ, как и в случае с моделью с бериллидом титана, имеет размер элемента, равный 0,05 см. Общее количество элементов составило 34205291 и 17100360 для штатного облучательного канала и ОУ соответственно. Приблизительно двукратная разница связана с включённой адаптивной регулировкой и, соответственно, самих геометрий моделей. Максимальные коэффициенты искривлённости, равные 21,90 для штатного облучательного канала и 40,74 для ОУ, объясняются вытянутостью вдоль оси z рассматриваемых моделей. Максимальные значения коэффициенты искривлённости (0,86 и 0,85) и минимальные значения ортогональных ка-

честв (0,14 и 0,15) соответствуют рекомендованным диапазонам, приведённым в руководстве ANSYS Fluent.

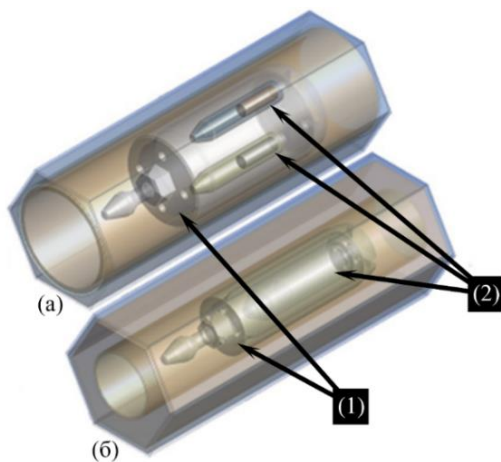


Рисунок 5. Трёхмерные модели штатного облучательного канала (а) и ОУ (б) в программе ANSYS Design Modeler, усечённые в рамках одной ячейки АЗ исследовательского реактора ВВР-К и высоте ± 3 см от головки капсулы и её нижней части. (1) – капсулы из сплава САВ-1, (2) – кварцевые ампулы с образцами MoO_3

Как уже говорилось ранее, в случае рассмотрения охлаждения компонентов АЗ на реакторе ВВР-К основной перенос тепла осуществляется принудительной конвекцией, вызванной работой главных циркуляционных насосов, которые обеспечивают расход теплоносителя первого контура около $680 \text{ м}^3/\text{ч}$ для штатной конфигурации АЗ. Для определения средней скорости воды было рассчитано гидравлическое сечение АЗ реактора с учётом комплексных геометрий его компонентов. Средняя принятая скорость воды составила приблизительно $48,4 \text{ см/с}$. Соответствующее значение числа Рейнольдса в несколько раз превышает критическое значение критерия подобия для гладких труб (~ 2300) и равняется около 22000, что свидетельствует об установившемся турбулентном режиме течения.

Для описания поведения воды была применена реализуемая модель турбулентности $k-\varepsilon$ ($k-\varepsilon$ Realizable), обладающая рядом преимуществ по сравнению с классической моделью $k-\varepsilon$ и другими турбулентными моделями. В частности, она использует переменную турбулентную вязкость и модифицированное уравнение переноса для скорости диссипации энергии ε и обеспечивает корректный расчёт в сложных геометриях, включая вихревые и вторичные образования, при умеренных вычислительных затратах.

Вклад естественной конвекции в теплообмен был оценён на основе отношения числа Грасгофа Gr к квадрату числа Рейнольдса Re . При полученном значении данного соотношения около 0,41 (для полной длины канала) и с учётом незначительного температурного перепада в модели (в отсутствие рециркуляции) можно считать влияние естественной конвекции

пренебрежимо малым. Таким образом, теплоноситель в модели представляет собой несжимаемую жидкость с плотностью при нормальных условиях. Доля лучистого теплообмена в рассматриваемой модели оценивалась на основе максимальной температуры порошка триоксида молибдена 200°C , полученной в ходе предварительных расчётов. Согласно закону Стефана-Больцмана, удельное энерговыделение молибденовой мишени составляет $4,73 \cdot 10^{-9} \text{ Вт/г}$, что более чем в 10^9 раз меньше удельного энерговыделения за счёт облучения мишени на реакторе. Следовательно, лучистым теплообменом в рассматриваемой задаче можно пренебречь. Для оценки вязкого нагревания, возникающего вследствие внутреннего трения жидкости, использовался безразмерный критерий Бринкмана. Полученное значение критерия (порядка 10^{-9}) свидетельствует о пренебрежимо малом вкладе данного механизма в общий теплообмен.

Моделирование пограничного слоя при турбулентном течении осуществлялось с применением метода усовершенствованного метода учёта пристенного слоя (EWT), который обеспечивает адаптивный выбор между настенными функциями (при $y^+ > 30$) и полным численным разрешением ламинарного подслоя (при $y^+ < 1$). В интервале $1 < y^+ < 30$ реализуется плавный переход между этими режимами. Таким образом достигается устойчивость расчёта при сохранении приемлемой плотности сетки в пристенных областях.

Начальная температура теплоносителя на входе в расчётную область была принята равной 40°C в соответствии с отчётом анализа и безопасности исследовательского реактора ВВР-К. При скорости потока $48,4 \text{ см/с}$, температура обратного потока воды на выходе была принята за 50°C – максимально допустимое значение согласно экспериментально измеренным данным, что соответствует разности температур на входе и выходе $\Delta T = 10^\circ\text{C}$. Манометрическое давление на выходе было принято равным 0 Па, однако учёт гидростатического и гидродинамического давлений был учтён путём включения силы притяжения в методике. Внешние поверхности твёрдых тел считались адиабатическими, а боковая граница модели жидкости имитировала межъячеечный теплоноситель с температурой 40°C . Проведённые предварительные расчёты показали, что температура воды не достигает точки кипения, а температура твёрдых компонентов (за исключением воздуха) остаётся ниже температур плавления, что позволяет исключить фазовые переходы и упростить проводимое численное моделирование.

Расчётные значения энерговыделений, полученные с использованием MCNP [9], приведены в таблице 2. Максимальная относительная погрешность, выраженная в виде удвоенного стандартного отклонения, не превышает 5%, что соответствует 95%-ной доверительной вероятности и допускает использование данных в ANSYS Fluent.

РАЗРАБОТКА И АНАЛИЗ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ОБЛУЧАТЕЛЬНОЙ КАПСУЛЫ, ПРЕДНАЗНАЧЕННОЙ ДЛЯ ПРОИЗВОДСТВА МО-99 В РЕАКТОРЕ ВВР-К

Таблица 2. Расчётные значения энерговыделения с учётом стандартного отклонения (2σ) для трёх конфигураций АЗ всех компонентов штатного ОК и ОУ

Конфигурация АЗ	Компонента	Энерговыделение		2σ
		Вт	Вт/г	
Штатная	Порошок MoO ₃ (правый)	23,8	4,76	0,06
	Кварцевая ампула SiO ₂ (правая)	41,2	5,10	
	Порошок MoO ₃ (левый)	23,0	4,61	
	Кварцевая ампула SiO ₂ (левый)	39,7	4,91	
	Капсула из САВ-1	539,5	3,03	
	Внутренняя часть ОК из САВ-1	757,3	3,14	
	Внешняя часть ОК из САВ-1	1198,2	3,89	
С бериллиевой ловушкой	Порошок MoO ₃	40,7	4,07	
	Кварцевая ампула SiO ₂	38,7	2,50	
	Капсула из САВ-1	232,6	2,29	
	Внутренняя часть ОУ из САВ-1	164,7	2,22	
	Внешняя часть ОУ из САВ-1	649,5	2,24	
	Бериллиевая засыпка	942,3	2,15	
С ОУ в ячейке 5-5	Порошок MoO ₃	42,2	4,22	
	Кварцевая ампула SiO ₂	52,3	3,38	
	Капсула из САВ-1	306,6	3,01	
	Внутренняя часть ОУ из САВ-1	219,4	2,95	
	Внешняя часть ОУ из САВ-1	918,2	3,17	
	Бериллиевая засыпка	1476,5	3,37	

Особое внимание было уделено оценке неопределённости численного моделирования. Комплексная погрешность включает вклад: (1) сеточной дискретизации; (2) модельных допущений; (3) численной сходимости; (4) неопределённости входных данных. Сеточная погрешность оценивалась сравнением с результатами, полученными на более грубой сетке (около $6 \div 7$ млн элементов для каналов и ОУ соответственно). Разность средних и максимальных температур образцов MoO₃ в расчётах составила не более 4,3%. Численная сходимость обеспечивалась достижением резидуальной ошибки 10^{-3} для уравнений скорости, энергии турбулентности и импульса, и 10^{-6} – для энергии. Ошибка входных данных минимизировалась за счёт использования усреднённых (экспериментально подтверждённых) значений температуры и скорости потока, а также выбора граничных условий, моделирующих наихудший сценарий (обратный поток и так далее). Погрешность упрощений была оценена ранее через критерии подобия. Отдельно стоит отметить вклад упрощения, что бериллиевая засыпка моделировалась как однородный материал с физическими свойствами металлического бериллия. Совокупная относительная неопределённость численного решения оценивается в пределах $\pm 10\%$.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Сравнение численных результатов с эталонными полями температуры и скорости, взятыми из руководства ANSYS Fluent, представлены на рисунке 6. Максимальная температура в расчётной модели составила 40,1 °C и наблюдалась вблизи входа горячей воды в систему. Максимальная скорость (136,3 см/с) была зафиксирована в зоне смешения двух потоков. На основе рисунка 6 можно заключить, что результаты, полученные в ходе численных вычислений, практически совпадают с эталонными данными из руководства ANSYS Fluent.

На рисунке 7 приведены температурные поля, полученные в ANSYS Fluent для обоих режимов, а также эталонное поле температур в [8], рассчитанное в программном комплексе COMSOL Multiphysics. Максимальные температуры в системе составили 82,2 °C при ламинарном и 79,3 °C при турбулентном течениях, при этом расчётная температура в COMSOL Multiphysics не превысила 85 °C. Данные значения, а также близость температурных профилей для ламинарного режима течения в ANSYS Fluent и COMSOL Multiphysics, подтверждают корректность применяемой методики в ANSYS Fluent. Важно отметить, что температурные поля для трёх конфигураций представлены с использованием различных шкал цветовой легенды, соответствующих индивидуальным диапазонам температур в каждом случае. В связи с этим прямое сравнение насыщенности окраски между изображениями различных вариантов некорректно и анализ следует проводить на основе приведённых числовых значений.

Поля компоненты скорости по оси z для обоих режимов течения приведены на рисунке 8. Анализ полученных данных показал, что при принятой скорости теплоносителя 0,1 см/с доминирующим механизмом теплопередачи является вынужденная конвекция, что и объясняет близость температурных полей для двух режимов течения теплоносителя. При ламинарном течении наблюдается протяжённый след жидкости, входящей через верхнее отверстие капсулы, что свидетельствует о меньшем перемешивании входящих потоков воды в алюминиевую капсулу. В турбулентном режиме, напротив, происходит образование обратного течения, связанного с вытеснением нагретой жидкости. Следствием этого является локальный нагрев жидкости, который можно увидеть на рисунке 7. Локальные изменения направления течения жидкости представлены на горизонтальных разрезах полей компоненты скорости по оси z на рисунке 9. Отрицательное значение скорости соответствует основному потоку, направленному вниз, положительное – встречному течению.

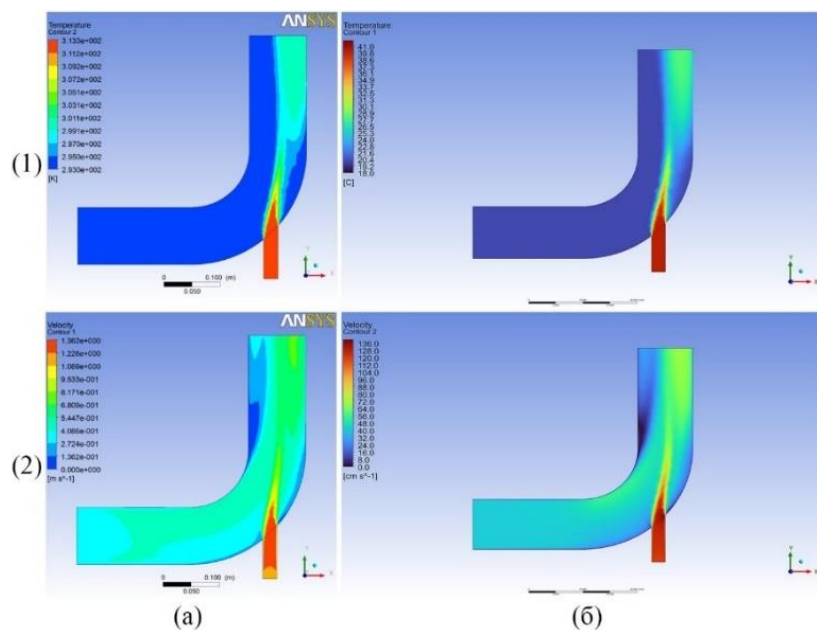


Рисунок 6. Сравнение эталонных результатов из руководства ANSYS Fluent: с результатами численного моделирования (а) и теплофизических расчётов (б) модели колена трубопровода температурного поля (1) и поля скоростей (2) на плоскости симметрии [7]

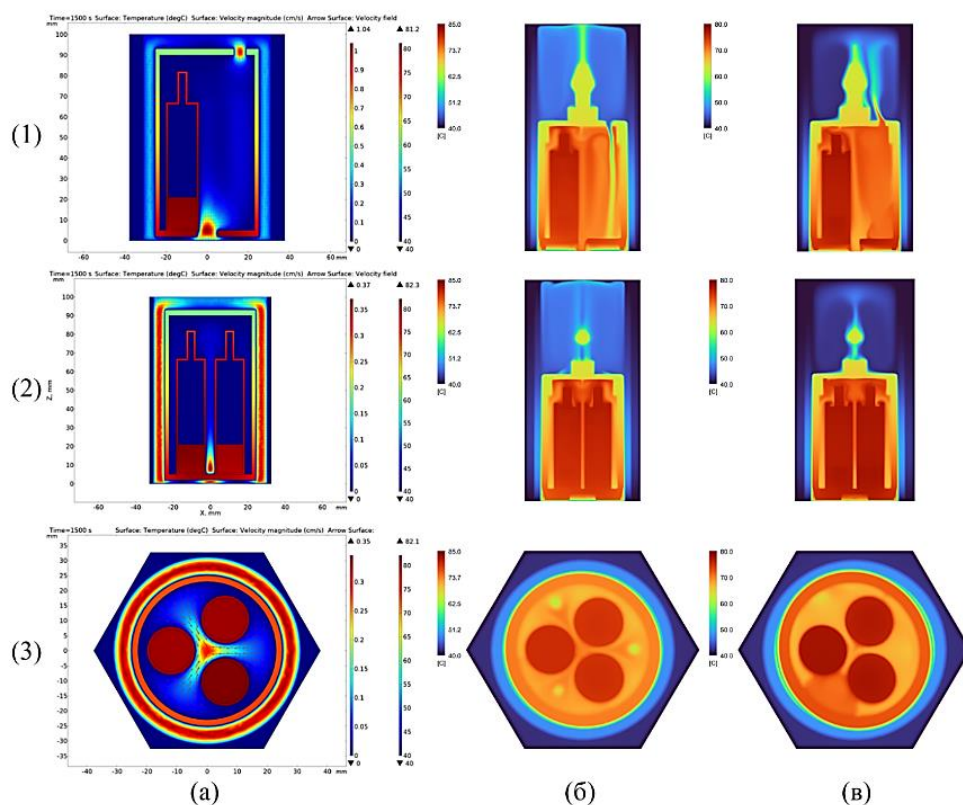


Рисунок 7. Температурные поля для расчётной модели: в COMSOL Multiphysics (а) [8], в ANSYS Fluent с ламинарным режимом течения (б) и в ANSYS Fluent с турбулентным режимом течения (в) для вертикальных разрезов (1) и (2) и горизонтального разреза (3)

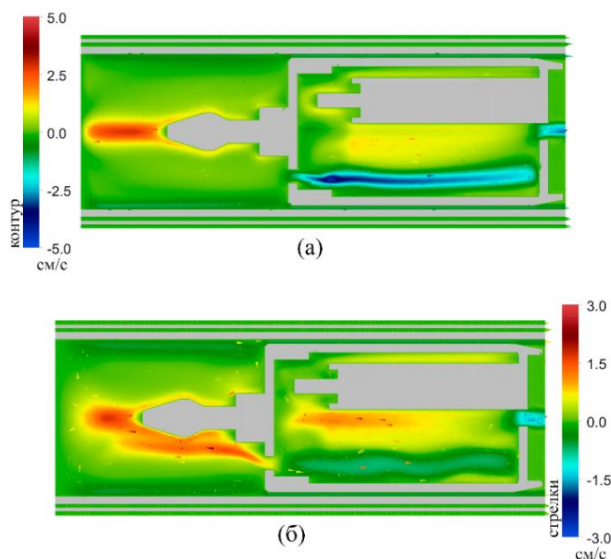


Рисунок 8. Вертикальные поля скоростей для моделирования ламинарного (а) и турбулентного (б) режимов, сечения по плоскости XZ с $Y = 0$ см

Согласно рисунку 9, рециркуляция теплоносителя в верхней части капсулы для турбулентного режима наблюдается только через одно из трёх доступных отверстий. В оставшихся двух движение жидкости сохраняет отрицательное направление вдоль оси z , что указывает на комплексную рециркуляцию в верхней части капсулы. Средняя скорость воды в кольцевом зазоре между внутренней поверхностью облучательного канала и внешней стенкой капсулы составляет около 1 см/с, что совпадает с результатами, полученными в эталонной модели COMSOL Multiphysics.

На основе анализа скоростных и температурных полей можно заключить, что формирующиеся вихревые структуры над и внутри капсулы обусловлены ламинарной рециркуляцией, поскольку они наблюдаются в обоих режимах течения. Локальные возмущения не оказывают значимого влияния на температурные характеристики модели, что свидетельствует о

корректности применяемой методики с учётом ламинарного режима течения и принятой скорости воды теплоносителя первого контура. Тем не менее, для более корректного описания гидродинамики с учётом турбулентных завихрений и вторичных течений на основном этапе расчётов использовалась реализованная турбулентная модель $k-\epsilon$.

В результате численного моделирования были получены температурные поля для штатного облучательного канала и ОУ, представленные на рисунке 10, причём для второго была визуализирована конфигурация с ОУ в высокопоточном канале без бериллиевой ловушки, поскольку температура образцов в ней на $5\div 7$ °C выше относительно конфигурации с бериллиевой ловушкой. Объясняется это различными спектрами нейтронов: в непосредственной близости к тепловыделяющим сборкам доля быстрых нейтронов больше, а тепловых и эпитепловых – меньше, что и приводит к большему разогреву ОУ.

Для визуального определения температуры воды на стенках кварцевой ампулы в легенде с цветовым распределением температур был выделен белым интервал температур $100\div 110$ °C. На основе визуализации температурных полей можно сделать заключение, что нагрев воды при прохождении через капсулу незначителен – максимальная температура теплоносителя составила 50,1 °C для всех трёх конфигураций. К тому же, данная температура была достигнута на границе выхода воды из модели, что связано с рециркуляцией под капсулой и последующим образованием обратного потока с заданной температурой 50 °C, которая была задана в качестве граничного условия. Максимальные температуры составили: 179,2 °C для штатного облучательного канала, 145,5 °C для ОУ в бериллиевой ловушке и 152,6 °C для высокопоточного канала. Стоит также отметить, что максимальные температуры бериллиевой засыпки в конфигурациях с бериллиевой ловушкой и с ОУ в высокопоточном канале составили 45,6 и 48,1 °C соответственно.

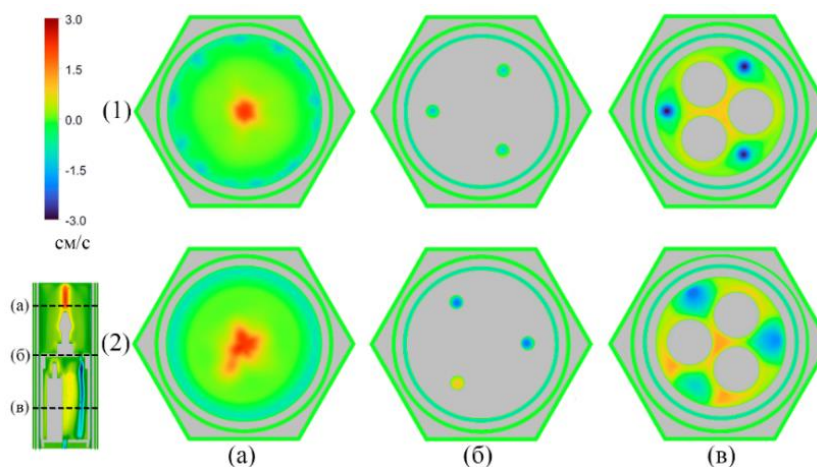


Рисунок 9. Горизонтальные поля скоростей для ламинарного (1) и турбулентного (2) режимов течения на высотах: 136 см (а), 86 см (б) и 36 см (в), которые показаны пунктиром на вертикальном разрезе под легендой

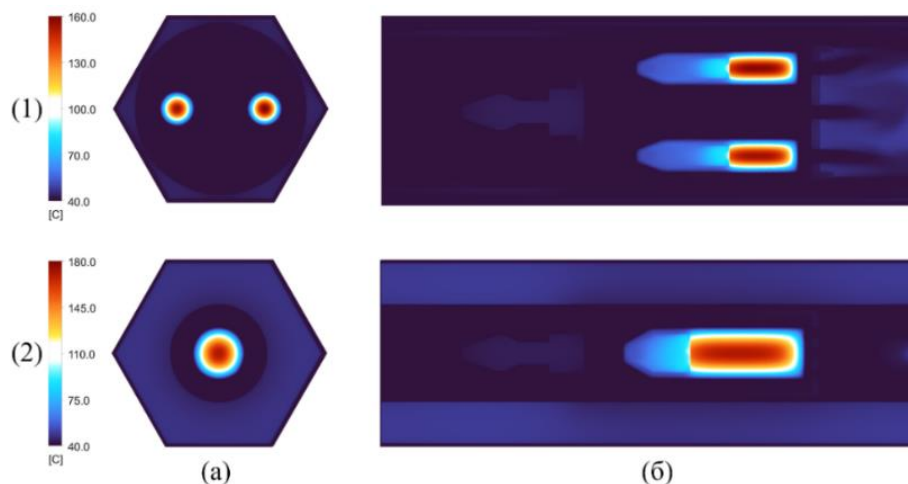


Рисунок 10. Горизонтальные (а) и вертикальные (б) распределения температур для штатного облучательного канала (1) и ОУ в высокопоточной ячейке (2)

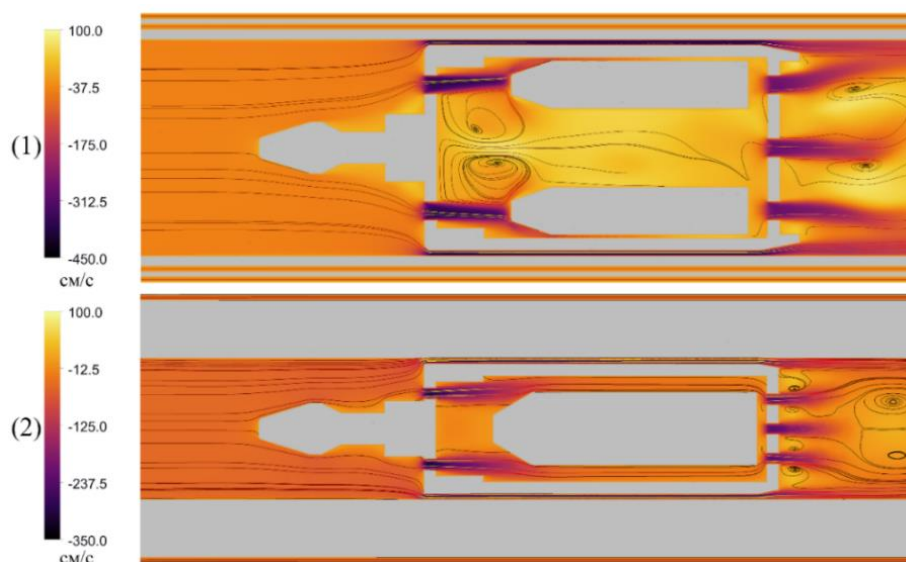


Рисунок 11. Вертикальные поля компоненты скорости вдоль направления течения для штатного облучательного канала (1) и ОУ в высокопоточной ячейке (2)

Распределения компоненты скорости по оси z для двух конфигураций представлены на рисунке 11. Здесь, в отличие от верификационной модели с бериллидом титана Be_{12}Ti , обратных потоков через отверстия в капсуле не наблюдаются, что обусловлено более высокой скоростью теплоносителя. В штатной конфигурации, из-за специфики расположения кварцевых ампул, турбулентные завихрения образуются в центрально-верхней области капсулы. Это приводит к образованию локальных восходящих потоков в центральной области капсулы. Аналогичные завихрения формируются под капсулой, особенно в областях, где отсутствует прямой отток воды из нижних отверстий капсулы. Максимальная скорость жидкости, равная 499,3 см/с для штатного облучательного канала, была зафиксирована в кольцевом зазоре между внутренней конструкцией канала из САВ-1 и капсулой.

Кроме того, за счёт специфической формы головки капсулы, направляющей поток теплоносителя в отверстия, наблюдается частичное смещение потока в область между кварцевыми ампулами и внутренней стенкой капсулы. В конструкции алюминиевой капсулы в ОУ подобный эффект отсутствует, поскольку отверстия имеют меньший диаметр, чем в штатной капсуле и расположены ближе к центру капсулы. Вследствие этого максимальная скорость теплоносителя в конфигурации с ОУ составила 417,1 см/с. Также отмечено, что при наличии лишь одной радиальной области для прохождения потока теплоносителя через капсулу крупномасштабные турбулентные завихрения внутри капсулы не формируются, однако сохраняются под ней. Всё это, в совокупности, подтверждает корректность выбранного отступа в 3 см от основания капсулы для стабилизации потока воды из зазора канал-капсула и из отверстий капсулы.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведённый в ANSYS Fluent теплофизический анализ ОУ показал, что максимальная температура в системе достигается в геометрическом центре порошка триоксида молибдена и составляет 152,6 °С. Температура теплоносителя, при этом, не превышает 50,1 °С, что подтверждает отсутствие фазовых переходов в системе и, следовательно, безопасность эксплуатации ОУ в условиях исследовательского реактора ВВР-К. Потенциально аварийные температурные режимы в ОУ не выявлены.

Полученные расчётные результаты могут быть использованы для проведения экспериментальных исследований на реакторе ВВР-К по определению удельной активности ⁹⁹Mo в составе ОУ. При этом могут быть рассмотрены и иные конфигурации с размещением ОУ, например, в периферийных каналах, поскольку в настоящем исследовании рассматривался наиболее энергонапряжённый сценарий – расположение ОУ в высокопоточном канале с размещением алюминиевой капсулы в центральную облучательную позицию. Таким образом, полученные данные обеспечивают надёжную верификационную основу для дальнейших экспериментальных и прикладных исследований.

ЛИТЕРАТУРА / REFERENCES

1. Li J., Xie R., Li B., Chen L., Shen W., Zhao Y., Gui Q., Chen L., Xu B., Chen X., Guan J., Chen L., Yang K., Chai Z., Wang S. Tumor Imaging by a ^{99m}TcO₄⁻-Labeled Cationic Polymeric Network // CCS Chemistry. – 2024. – Vol. 6, No. 8. – P. 1868–1875.
2. Technology for Production of Portable Tc-99m Gel Generators Using Neutron Activated Natural Molybdenum [Электронный ресурс]. – URL: <https://www-pub.iaea.org/MTCD/Publications/PDF/SupplementaryMaterials/TRS478CD/Kazakhstan.pdf> (дата обращения: 07.04.2025).
3. Non-HEU Production Technologies for Molybdenum-99 and Technetium-99m [Электронный ресурс]. – URL: https://www-pub.iaea.org/MTCD/Publications/PDF/Pub1589_web.pdf (дата обращения: 06.04.2025).
4. Ryabchikov A., Skuridin V., Nesterov E., Chibisov E., Golovkov V. Obtaining molybdenum-99 in the IRT-T research reactor using resonance neutrons // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. – 2004. – Vol. 213. – P. 364–368.
5. Feasibility Studies of Producing ⁹⁹Mo by Capture in the IEA-R1 Research Reactor [Электронный ресурс]. – URL: <https://www.rertr.anl.gov/Mo99-98/RConcilio.pdf> (дата обращения: 11.04.2025).
6. Ашибаев А.Ч. Оптимизация условий облучения на реакторе ВВР-К для повышения удельной активности Мо-99 // Сборник тезисов Международной научной конференции студентов и молодых учёных «ФАРАБИ ЭЛЕМИ», Секция «Теплофизика и теоретической теплотехника». – 2025. – С. 114–115. [Ashibaev A.Ch. Optimizatsiya usloviy oblucheniya na reaktore VVR-K dlya povysheniya udel'noy aktivnosti Mo-99 // Sbornik tezisev Mezhdunarodnoy nauchnoy konferentsii studentov i molodykh uchenykh “FARABI ELEMII”, Sektsiya “Teplofizika i teoreticheskoy teplo tekhnika”. – 2025. – P. 114–115. (In Russ.)]
7. ANSYS Fluent Workbench Tutorial Guide 2021 R2 [Электронный ресурс]. – URL: https://dl.cfdexperts.net/cfd_resources/Ansys_Documentation/Fluent/Ansys_Fluent_Workbench_Tutorial_Guide_2021_R2.pdf (дата обращения: 27.04.2025).
8. Sairanbayev D. S., Shaimerdenov A. A., Akhanov A. M., Silnyagin P. P., Gizatulin Sh. Kh., Shairov B. B., Udartsev S. B. Thermophysical analysis of the irradiation experiment of titanium beryllide samples in the WWR-K reactor // Recent Contributions to Physics. – 2023. – Vol. 84, No. 1. – P. 65–71.
9. MCNP Version 6.2 Release Notes [Электронный ресурс]. – URL: https://mcnp.lanl.gov/pdf_files/TechReport_2018_LANL_LA-UR-18-20808_WernerBullEtAl.pdf (дата обращения: 21.04.2025).

ССР-Қ РЕАКТОРЫНДА МО-99 ӨНДІРУГЕ АРНАЛҒАН СӘУЛЕЛЕНДІРУ КАПСУЛАСЫНЫҢ ЖЫЛУФИЗИКАЛЫҚ МОДЕЛІН ӘЗІРЛЕУ ЖӘНЕ ТАЛДАУ

А. Ч. Ашибаев*, Д. С. Сайранбаев, А. А. Шаймерденов

ҚР Атом энергиясы жөніндегі агенттігінің «Ядролық физика институты» РМК, Алматы, Қазақстан

* Байланыс үшін e-mail: ashibaev@inp.kz

⁹⁹Mo-ның меншікті белсенділігін арттыруға арналған сәулелендіру капсуласының конструкциясына жылуфизикалық талдау нәтижелері ұсынылған. Есептеу ANSYS Fluent 2021 R2 бағдарламалық кешенінде белсенді аймақтың үш түрлі конфигурациясы үшін, соның ішінде стандартты сәулелендіру капсуласы үшін жүргізілді. Молибден триоксиді ұнтағының максималды температурасы 152,6 °С, ал жылу тасығыштың температурасы 50,1 °С-тан аспайтыны көрсетілді. Бұл деректер әзірленген сәулелендіру құрылғысының ССР-Қ зерттеу реакторында түрлі конфигурацияларда қауіпсіз пайдаланылуын растайды.

Түйін сөздер: зерттеу реакторы, молибден-99, сәулелендіру құрылғысы, жылу режимі, жылуфизикалық модель.

DEVELOPMENT AND THERMOPHYSICAL ANALYSIS OF AN IRRADIATION CAPSULE MODEL
FOR MO-99 PRODUCTION IN THE WWR-K REACTOR

A. Ch. Ashibaev^{*}, D. S. Sayranbaev, A. A. Shaymerdenov

RSE “Institute of Nuclear Physics” of the Agency of the Republic of Kazakhstan for Atomic Energy, Almaty, Kazakhstan

** E-mail for contacts: ashibaev@inp.kz*

The paper presents the results of a thermophysical analysis of an irradiation capsule design intended to increase the specific activity of ⁹⁹Mo in the WWR-K research reactor. Numerical simulations were performed using the ANSYS Fluent 2021 R2 software package for three configurations of the reactor core, including the standard irradiation capsule. It is demonstrated that the developed irradiation device ensures a reliable thermal regime, with the maximum temperature of molybdenum trioxide powder reaching 152.6 °C and the coolant temperature not exceeding 50.1 °C. The results confirm the safe operation of the irradiation device within various core configurations of the WWR-K reactor.

Keywords: *research reactor, molybdenum-99, irradiation device, thermal regime, thermophysical model.*

<https://doi.org/10.52676/1729-7885-2025-4-65-78>

УДК: 628.16.08:54.05

MXENE ЖӘНЕ НАНОЦЕЛЛЮЛОЗА НЕГІЗІНДЕГІ КОМПОЗИТТІ МЕМБРАНАЛАР: ҚАСИЕТТЕРІ ЖӘНЕ СУДЫ ТАЗАЛАУДАҒЫ ТИІМДІЛІГІ

А. Т. Табынбаева¹, А. Р. Сатаева¹, Н. А. Ахметов², К. Т. Тастамбек^{1,2}, Ж. Т. Тауанов^{1,2*}

¹ «Әл-Фараби атындағы Қазақ Ұлттық Университеті», Алматы, Қазақстан,

² «Қожа Ахмет Ясауи атындағы Халықаралық қазақ-түрік университеті», Түркістан, Қазақстан

* Байланыс үшін E-mail: tauanov.zhandos@kaznu.kz

Қазіргі таңда су ресурстарының тапшылығы мен сапасының төмендеуі экологиялық және әлеуметтік маңызды мәселе болып отыр. Өнеркәсіптік өндіріс, ауыл шаруашылығы және тұрмыстық қызмет нәтижесінде өзендер, көлдер және жер асты сулары ауыр металдар, органикалық бояғыштар, фармацевтикалық қалдықтар, микропластиктер және патогенді микроағзалармен ластанады. Бұл экосистемелердің бұзылуына, биотаға зиян келуіне және адам денсаулығына қауіп төндіреді. Дәстүрлі тазалау әдістері – тұндыру, хлорлау, адсорбция, ионалмастырғыш шайырлар – күрделі құрамдағы немесе жоғары концентрациядағы ластағыштарды толық жоя алмайды. Осыған байланысты мембраналық технологиялар суды молекулалық деңгейде бөлуге, энергияны аз тұтынуға және экологиялық қауіпсіздікті қамтамасыз етуге мүмкіндік беретін перспективалы бағыт болып саналады.

Соңғы жылдары MXene және наноцеллюлоза негізіндегі композитті мембраналар ерекше қызығушылық тудырды. MXene – MAX фазаларынан алынған екіөлшемді карбидтер мен нитридтердің тобы, оның қабаттық құрылымы, жоғары электрөткізгіштігі, гидрофильділігі және функционалды беткі топтары мембраналардың өткізгіштігін арттырып, иондарды бөлу мен органикалық ластағыштарды адсорбциялау тиімділігін жақсартады. Наноцеллюлоза биологиялық тұрғыдан ыдырайтын наноматериал болып, мембрананың механикалық беріктігін, тұрақтылығын және биосәйкестігін қамтамасыз етеді, сондай-ақ селективтілік пен ластануға қарсы қасиеттерін арттырады.

MXene мен наноцеллюлозаның комбинациясы синергиялық әсер көрсетеді: наноцеллюлоза MXene қабаттарының агрегациясын болдырмайды, ал берік фаза әрекеттесу мембрананы ақаулардан қорғайды. Бұл тұщыландыру, ауыр металдарды, органикалық бояғыштарды, дәрілік қалдықтарды және микропластиктерді тиімді өңдеуге мүмкіндік береді. Сонымен қатар, композиттің қабаттық құрылымы мен функционалды топтары ұзақ мерзімді тұрақтылық пен жоғары өнімділікті қамтамасыз етеді.

Мақалада MXene мен наноцеллюлозаның қасиеттері, композитті мембраналарды алу әдістері, құрылымдық сипаттамалары және суды тазалауда қолдану перспективалары жан-жақты қарастырылады. Зерттеу жаңа буын мембраналық технологиялардың экологиялық қауіпсіз, жоғары өнімді және тұрақты болуына қатысты әлеуетін көрсетеді, бұл суды тиімді тазалау мен ұзақ мерзімді тұрақтылыққа қол жеткізуде маңызды ғылыми және практикалық мәнге ие.

Түйін сөздер: MXene, наноцеллюлоза, селективтілік, композитті мембрана, ауыр металдар, су тазалау.

КІРІСПЕ

Су ресурстарының тапшылығы мен сапасының төмендеуі бүгінгі таңда жаһандық деңгейдегі ең өзекті экологиялық және әлеуметтік мәселелердің бірі болып отыр. Қазіргі таңда өзендер мен көлдердің, сондай-ақ жер асты суларының ластануы өнеркәсіптік өндіріс, ауыл шаруашылығы және тұрмыстық қызмет салдарынан қарқынды жүріп жатыр. Су жүйелеріне түсетін ластағыштардың қатарына ауыр металдар, органикалық бояғыштар, дәрілік препараттар, пестицидтер, микропластиктер және патогенді микроағзалар жатады [1, 2]. Мұндай заттардың жинақталуы экосистемелердің бұзылуына, биотаға уытты әсердің артуына және адам денсаулығына қауіптің күшеюіне әкеледі.

Әсіресе, ауыр металдардың (сынап, қорғасын, кадмий, хром), тұрақты органикалық қосылыстардың және антибиотиктердің суда болуы күрделі экологиялық мәселелерді туындатады. Бояғыш заттар су ортасының түсін өзгертіп қана қоймай, фотосинтез процесін тежейді және мутагенді әсер көрсетуі мүмкін.

Микропластик пен дәрілік қалдықтардың тірі ағзаларда биожинақталуы қазіргі таңда ғалымдар арасында ерекше алаңдаушылық тудырып отыр [3, 4].

Суды тазалаудың дәстүрлі әдістері – тұндыру, хлорлау, адсорбция, ионалмастырғыш шайырлар – белгілі бір дәрежеде тиімді болғанымен, жоғары концентрациядағы немесе күрделі құрамдағы ластағыштарды толық жоюға қабілетті емес [5]. Осыған байланысты мембраналық технологиялар соңғы онжылдықта су тазалаудың ең үмітті бағыттарының біріне айналды. Олар молекулалық деңгейде бөлуге, энергияны салыстырмалы түрде аз тұтынуға және экологиялық қауіпсіздікті қамтамасыз етуге мүмкіндік береді [6, 7]. Алайда, дәстүрлі полимерлі мембраналардың қолданылуында да бірқатар шектеулер бар: олар механикалық және химиялық тұрақтылығы төмен, ластағыштарға қарсы тозуға бейім және биоластануға сезімтал [8]. Осыған байланысты ғалымдар жаңа буын мембраналық материалдарды әзірлеуде наноматериалдарды пайдалануға ерекше назар аударып отыр.

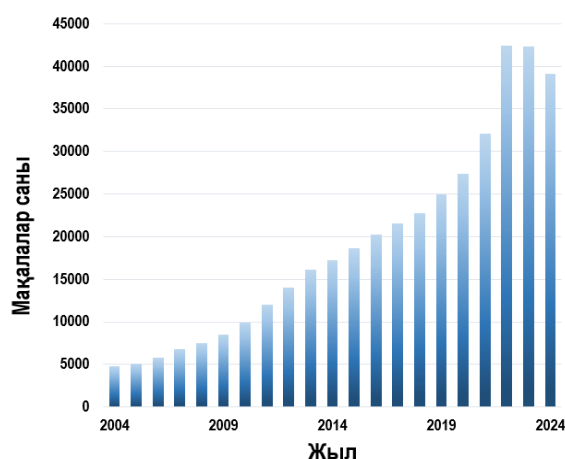
Наноцеллюлоза – жаңартылатын биомассадан алынатын, биологиялық тұрғыдан ыдырайтын наномасштабты материал. Оның жоғары механикалық беріктігі, үлкен меншікті беткі ауданы, гидрофильділігі және модификацияға икемділігі мембраналардың селективтілігі мен өнімділігін арттыруға мүмкіндік береді [9].

МХене – МАХ фазаларынан алынатын екіөлшемді карбидтер мен нитридтер тобы. Бұл материалдың электрөткізгіштігі, гидрофильділігі, функционалды топтарының болуы және қабаттық құрылымы су тазалаудағы адсорбция және ион селективтілігі процестерін жақсартуға жағдай жасайды [10]. Зерттеулер МХене негізіндегі материалдардың ауыр металдарды, органикалық бояғыштарды, тұздарды және бактерияларды тиімді бөлу қабілетін көрсетіп отыр [11–13].

1 КОМПОЗИТТІ МЕМБРАНАЛАР

1.1 Композитті мембраналардың жіктелуі

Соңғы 20 жылда су тазартуға арналған композитті мембраналар бойынша жарияланымдар саны айтарлықтай өсті (сурет 1).



1–сурет. Суды тазартуға арналған композитті мембраналар бойынша ғылыми жарияланымдардың жылдар бойынша өсуі

2004–2010 жылдары зерттеулер біртіндеп көбейсе, кейіннен наноматериалдар (TiO_2 , графен, МХене) мен гибриді құрылымдардың (металл-органикалық каркастар, композиттер) дамуына байланысты қарқын алды [14–16]. 2019 жылдан кейін зерттеулер саны күрт артып, 2022–2023 жылдары 40 000-нан асты, бұл су тазарту технологияларын жетілдіруге деген сұраныстың артуымен байланысты.

Соңғы он жылда полимерлі композиттік мембраналарды әзірлеу және функционализациялау бағытында айтарлықтай прогресс байқалды. Бұл саладағы зерттеулер мембраналардың селективтілігін, өткізгіштігін және төзімділігін арттыруға бағытталған [17].

Функционалды наноматериалдары бар полимерлі композиттік мембраналар

Полимерлі мембраналарда функционалды наноматериалдарды қолдану – қазіргі зерттеулердің маңызды бағыттарының бірі. Мысалы, МХене-ді қосу мембра-

налардың гидрофильділігін, иондық таңдамалылығын және тұрақтылығын арттырады, сондай-ақ агрессивті ортада өткізгіштікті сақтайды, бұл оларды әртүрлі сүзу процестерінде тиімді қолдануға мүмкіндік береді [18]. Сонымен қатар, МХене мембраналардың механикалық және термиялық қасиеттерін жақсартады, бұл олардың су тазарту және газдарды бөлу саласында қолданылу аясын кеңейтеді [19].

Сонымен бірге, графен оксиді (GO) қосылған мембраналар гидрофильділікті және өткізгіштікті жақсартып, суды тазарту тиімділігін арттырады [20]. Ал металл-органикалық каркастар (МОК) қосылған мембраналар кеуекті құрылымды жақсартып, жоғары селективтілік пен өткізгіштікке қол жеткізеді [21].

Органикалық емес толтырғыштары бар гибриді мембраналар

Тағы бір қызықты бағыт – органикалық емес толтырғыштары бар гибриді мембраналарды әзірлеу, мысалы, МОК материалдары. Мұндай мембраналар керемет өткізгіштікті және жоғары селективтілікті көрсетеді [21–23].

Олар газдар мен сұйықтықтарды бөлу процестері үшін ерекше тиімді. Зерттеулер көрсеткендей, металл-органикалық каркастар негізіндегі мембраналар жоғары қысымдарда да тұрақтылықты қамтамасыз етеді, бұл оларды әртүрлі өнеркәсіптік процестерде қолдануға жарамды етеді [24].

Наноқұрылымдық мембраналар

Мембраналардың наноқұрылымдануы ерекше қасиеттерге жетуге мүмкіндік береді, мысалы, өлшемі бақыланатын саңылаулар мен ионды арналардың пайда болуы. Соңғы зерттеулер көрсеткендей, наноқұрылымдық мембраналар төмен энергия шығындарымен жоғары өнімділікке қол жеткізуі мүмкін, бұл оларды әртүрлі бөліп алу процестеріне өте тиімді етеді [25].

Мембраналардың наноқұрылымдануы материалдың селективтілік пен өткізгіштік қасиеттерін айтарлықтай жақсартуға мүмкіндік береді. Нанокеуектер мен иондық арналардың өлшемін бақылау арқылы иондарды бөлу тиімділігі артып, суды тұщыландыру және ластағыштарды жою процестерінде энергия шығынын төмендету мүмкіндігі туады. Соңғы зерттеулерде дәл осы тәсіл литий иондарын селективті түрде бөліп алуда тиімді екендігі көрсетілген [26].

Сонымен қатар, екіөлшемді материалдарға негізделген мембраналар (мысалы, MoS_2) су тазарту және тұщыландыру саласында жоғары нәтижелер көрсетті [27]. Мұндай наноқұрылымды мембраналар судың жоғары өткізгіштігін сақтай отырып, иондар мен тұздардың өтуін тиімді түрде шектейді [27, 28]. Бұл қасиет оларды жаңа буынның сүзгіш жүйелерде қолдануға тиімді етеді, себебі мембранадағы ұйымдасқан наноканалдар судың өтуін жеңілдетіп, тұздық иондарға тосқауыл болады [28, 70].

Биомиметикалық мембраналар

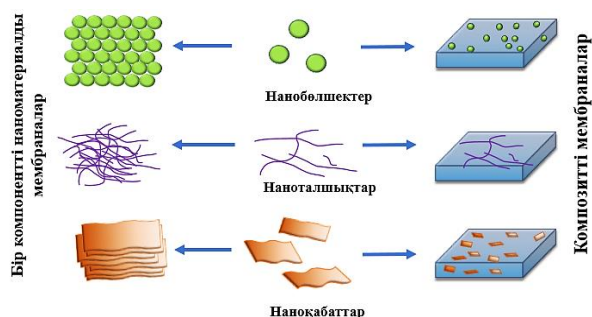
Биомиметикалық технологияларды қолдану мембраналық материалдарды дамытудағы маңызды

қадам болды. Аквакеуектер мен беткі сіңірімділікті бағыттау арқылы мембраналар жоғары өткізгіштікке және ластануға тұрақтылыққа қол жеткізді. Мұндай мембраналар, табиғи сүзгілеу механизмдерін имитациялай отырып, минималды ластанумен жоғары тиімділікті қамтамасыз етеді [29].

Ионды сұйықтықтар негізіндегі мембраналар

Ионды сұйықтықтар – химиялық әсерлерге тұрақтылығын жақсартатын және антифулингтік қасиеттері бар мембраналардың құрамына енгізілетін ерекше материалдар. Ионды сұйықтықтары бар мембраналар дәстүрлі полимерлі мембраналарға қарағанда ластануға төмен сезімтал және иондар мен органикалық молекулаларды бөлуде жоғары таңдамалылыққа ие. Бұл ерекшеліктер олардың сүзу және басқа процестерде қолдану үшін жана мүмкіндіктер ашады [30, 31].

Соңғы он жылда композиттік мембраналар технологиясының айтарлықтай дамығаны байқалады, бұл олардың тиімділігін, селективтілігін және тұрақтылығын арттыруға бағытталған. Нанокұрылымды материалдарды мембраналық жүйелерге біріктіру олардың құрылымдық және функционалдық қасиеттерін айтарлықтай жақсартады. Бұл тәсіл бір компонентті наноматериалдар негізінде жасалған мембраналармен қатар, композитті мембраналар әзірлеуге де мүмкіндік береді. 2-суретте нанобөлшектер, наноталшықтар және наноқабаттардан тұратын мембраналық құрылымдардың қалыптасу жолдары бейнеленген.



2-сурет. Нанокұрылымдардың мембраналық технологияларға интеграциясы.

Композитті мембраналарда қолданылатын материалдар

Полимерлі матрицалар

Композитті мембраналарда қолданылатын полимерлі матрицаларға полиамид, полиэфирсульфон, поливинилиденфторид (ПВДФ), хитозан және полиакрилонитрил (ПАН) сияқты материалдар жатады. Бұл полимерлер мембраналардың жоғары механикалық және химиялық қасиеттерін қамтамасыз етіп, оларды әртүрлі қолдану салаларына, соның ішінде суды тұщыландыру, ластаушы заттарды селективті түрде бөлу және биомедициналық қолданбаларға жарамды етеді [32–34].

Мысалы, полиамидті және полиимидті мембраналар олардың жоғары селективтілігі мен ластануға

төзімділігі арқасында тұщыландыру процестерінде кеңінен қолданылады [35].

Полиэфирсульфон (PES) мембраналарының құрылымына МХене және полианилин (PANI) полимерін енгізу арқылы олардың электрөткізгіштігі артады және антифулинг қасиеттері жақсарады, бұл оларды су тазарту және бояғыштарды бөлу үшін тиімді етеді [36].

Поливинилиденфторид (ПВДФ) мембраналық технологияларда кеңінен қолданылады. МАФ-4 материалымен модификацияланған ПВДФ негізіндегі композитті мембраналар жоғары су өткізгіштігімен және қақтың түзілуіне төзімділігімен ерекшеленеді, бұл оларды мембраналық дистилляция үшін перспективалы етеді [37]. Басқа зерттеулер көрсеткендей, анионды балшықты нанобөлшектермен және көміртекті кванттық нүктелермен толықтырылған ПВДФ мембраналары ауыр металдарды адсорбциялау және анықтау үшін тиімді қолданылады [38].

Биополимерлі мембраналар, мысалы, хитозан негізіндегі мембраналар, олардың биологиялық ыдырайтын қасиеттері мен ластаушы заттарды адсорбциялау қабілетінің жоғары болуына байланысты кеңінен зерттелуде. Мысалы, титан диоксиді (TiO_2) қосылған хитозан мембраналары су тазартуда тамаша нәтижелер көрсетеді [39].

Полиакрилонитрил (ПАН) мембраналары МХене/көміртекті нанотүтікшелер көпқабатты нанокұрылымдарымен модификацияланып, өнеркәсіптік ағынды сулардан майлар мен бояғыштарды тиімді жоюға мүмкіндік береді [40]. Сонымен қатар, ПВДФ/ПАН негізіндегі электроспиннинг әдісімен жасалған мембраналар натрий-иондық батареялар мен қысым датчиктерінде сепаратор ретінде қолданылады, бұл олардың функционалды мүмкіндіктерін кеңейтеді [41].

Функционалды толтырғыштар

Функционалды толтырғыштар композиттік мембраналарды модификациялауда маңызды рөл атқарады, олардың механикалық, сорбциялық және тасымалдау қасиеттерін жақсартады. Олардың ішінде көміртекті наноматериалдарға, металл оксидтеріне, цеолиттерге, МХене және функционалды нанобөлшектерге ерекше көңіл бөлінеді.

Көміртекті наноматериалдар, мысалы, графен оксидтері мен көміртекті нанотүтікшелер (КНТ), мембраналық құрылымдарды нығайту үшін белсенді қолданылады. Олар механикалық беріктікті және мембраналардың тұрақтылығын арттырып қана қоймай, селективтілік пен өткізгіштікті жақсартады. Мысалы, көміртекті нанотүтікшелерді полимерлі матрицаға қосу мембрананың гидрофильдігін арттырады, бұл олардың ластануын азайтады және қызмет ету мерзімін ұзартады [42]. Графен оксидтері жоғары беттік ауданы мен ерекше электрондық құрылымы арқасында мембраналардың сорбциялық қабілетін арттырады, бұл оларды су тазарту және заттарды селективті бөлу үшін перспективалы материал етеді.

МХЕНЕ ЖӘНЕ НАНОЦЕЛЛЮЛОЗА НЕГІЗІНДЕГІ КОМПОЗИТТІ МЕМБРАНАЛАР: ҚАСИЕТТЕРІ ЖӘНЕ СУДЫ ТАЗАЛАУДАҒЫ ТИІМДІЛІГІ

Металл оксидтері, мысалы, TiO_2 , Fe_3O_4 және ZrO_2 , фотокаталитикалық және сорбциялық қасиеттерінің арқасында кеңінен қолданылады. Композиттік мембраналарға TiO_2 нанобөлшектерін енгізу биологиялық ластануға төзімділікті арттырады және су тазарту процестерінде тиімділікті жоғарылатады [43]. Fe_3O_4 негізіндегі магнитті нанокомпозиттер ауыр металдарды судан бөлуде жоғары тиімділік көрсетеді. Wei Long және әріптестері мұнай-химия өндірісінің ағынды суларынан Cr(VI) иондарын бөлу үшін $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{Saccharomyces cerevisiae}$ магнитті нанокомпозитін қолданды [44]. *Saccharomyces cerevisiae* бұл биосорбциялық қасиеттерге ие біржасушалы ашытқы саңырауқұлақ, ол матрица ретінде Fe_3O_4 нанобөлшектерін тұрақтандырады және иондарды байланыстыру қабілетін арттырады. Зерттеу барысында адсорбция кинетикасы мен изотермалары талданды, сонымен қатар рентген фотоэлектрондық спектроскопия әдісі қолданылып, иондардың байланысу механизмдері айқындалды [44].

Li және әріптестері ұсынған «ядро-қабықша» құрылымды Fe_3O_4 композиті де Cr(VI) иондарын тиімді адсорбциялай алатынын көрсетті. Бұл жұмыста әртүрлі рН мәндерінің әсері қарастырылып, Cr^{6+} иондарының формалары (HCrO_4^- , CrO_4^{2-}) адсорбция процесіне айтарлықтай ықпал ететіні дәлелденді [45].

Zhou және әріптестері әзірлеген ксантатпен модификацияланған $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{SiO}_2$ негізіндегі поливинил спирті/хитозан композиті Cd^{2+} сияқты ауыр металл иондарын ерітіндіден жоғары тиімділікпен жоятыны анықталды [46].

Цеолиттер мен МХене композиттік мембраналарды жасауда үлкен әлеуетке ие. Цеолиттер жоғары кеуектілігі мен тұрақтылығының арқасында газдар мен сұйықтықтарды селективті бөлу үшін перспективалы материал болып табылады. Олардың құрылымы органикалық қосылыстар мен ауыр металдарды тиімді түрде жоюға мүмкіндік береді, бұл оларды су тазарту және сүзу процестерінде таптырмас етеді [47]. МХене ерекше электрлік және механикалық қасиеттерінің арқасында жоғары өткізгіштігі бар мембраналарды жасау үшін қолданылады, бұл интеллектуалды мембраналық жүйелерді дамытуға жол ашады.

Функционалды нанобөлшектер, мысалы, күміс (Ag), алтын (Au) және металл-органикалық каркастар, мембраналарға антибактериалды және каталитикалық қасиеттер беру үшін белсенді түрде енгізіледі. Күміс пен алтын нанобөлшектері айқын антимикробтық белсенділікке ие, бұл мембраналық беттердің биоластануын болдырмауға көмектеседі. МОК қосу сорбциялық сипаттамаларды жақсартады және органикалық ластағыштарды бөлу тиімділігін арттырады [48].

Мембраналардың құрылымдық және жұмыс сипаттамалары олардағы толтырғыш ретінде қолданылатын наноматериалдардың түріне байланысты өзгеріп отырады. Әртүрлі функционалды толтырғыштар өткізгіштікке, селективтілікке, механикалық беріктікке және антибактериалды қасиеттерге әртүрлі деңгейде әсер етеді. Бұл мәліметтер 1-кестеде жинақталып көрсетілген.

1-кесте. Әртүрлі функционалды толтырғыштардың мембраналардың қасиеттеріне әсері.

Толтырғыш түрі	Негізгі қасиеттері	Мембранаға әсері	Қолдану саласы	Дереккөз
Көміртек наноматериалдар (графен оксиді, КНТ)	Жоғары механикалық беріктік, электрөткізгіштік, үлкен беткі аудан	Гидрофилділікті арттырады, мембрана селективтілігін жақсартады	Су тазарту, газ бөлу, биомедицина, электроника	[42, 49]
Металл оксидтері (TiO_2 , Fe_3O_4 , ZrO_2)	Фотокатализ, магниттік қасиеттер, жоғары химиялық тұрақтылық	Антибактериалды қасиеттер қосады, судан ауыр металдарды бөлуді жақсартады	Су және ауа тазарту, катализ	[50]
Цеолиттер	Жоғары кеуектілік, жоғары селективтілік	Ластаушы заттарды сорбциялау қабілетін арттырады	Газ және сұйықтық бөлу, су тазарту	[47, 51]
МХене	Жоғары өткізгіштік, механикалық қасиеттер	Өткізгіштігін арттырады	Ақылды мембраналық жүйелер, энергияны сақтау	[52]
Функционалды нанобөлшектер (Ag, Au, МОК)	Антибактериалды, каталитикалық белсенділік	Ластануға төзімділігін арттырады	Биомедицина, суды зарарсыздандыру, сенсорлар	[53, 54]

Осылайша, композиттік мембраналарда функционалды толтырғыштарды қолдану олардың пайдалану сипаттамаларын жақсартуға кең мүмкіндіктер ашады.

Hg²⁺ иондарын және басқа ауыр металдарды селективті байланыстыруға арналған функционалды топтар

Тиолды, карбоксилді және аминдік топтар металл иондарымен күшті кешендер түзіп, сорбция тиімділігін арттырады. Бұл топтар жоғары химиялық белсенділікке ие, бұл оларды металл иондарын су ерітінділерінен сорбциялау процестерінде тиімді етеді [55].

Көптеген зерттеулер бұл топтардың Pb^{2+} , Cd^{2+} , Ni^{2+} және Hg^{2+} иондарын бөлуде жоғары селективтілік көрсететінін дәлелдеді. Мысалы, карбоксилді және тиолды топтармен модификацияланған магнитті наносорбенттер бірнеше ионды бір мезетте тиімді жоя алады [55, 56].

Аминдік топтармен және тиол топтарымен өңделген активтендірілген көмір Pb^{2+} және Hg^{2+} иондарын толық дерлік жоя алады. Бұл материалдар сорбция жылдамдығы жоғары, ал адсорбция процесі — химиялық және ион алмасу механизмдерінің үйлесімі арқылы жүреді. Сонымен қатар, бұл модификация-

ланған көмір сорбенттері бірнеше қайта қолдануға жарамды, яғни оларды регенерациялау мүмкіндігі бар [57].

Ал хитозан мен оның туындылары құрамындағы аминдік және гидроксил топтарының арқасында ауыр металдарды байланыстыруда кеңінен қолданылады. Олар биосорбент ретінде экологиялық тұрғыдан қауіпсіз және жоғары адсорбциялық сыйымдылыққа ие [58]. Осылайша, функционалды сорбенттерді әзірлеу ауыр металл иондарынан суды тазарту үшін жоғары тиімді жүйелерді жасауға бағытталған өзекті міндет болып қала береді.

2 СУДЫ ТАЗАЛАУДА КОМПОЗИТТІ

МЕМБРАНАЛАРДЫҢ ТИІМДІЛІГІ

Мембраналардың су сіңіргіштігі

Мембраналардың су сіңіргіштігі – олардың гидрофильділігін және ылғалды ұстап тұру қабілетін анықтайтын маңызды параметр болып табылады. Бұл көрсеткіш келесі формула бойынша есептеледі:

Мұндағы W_m және W_d сәйкесінше ылғалданған (г, мг) және құрғақ мембрананың массасын (г, мг) білдіреді.

$$\% \text{ Су сіңіргіштік} = \left(\frac{W_m - W_d}{W_m} \right) \cdot 100.$$

Мембрананың кеуектілігі

Мембрананың кеуектілігі оның сұйықтықтар мен газдарды өткізу қабілетін анықтайды, сондай-ақ селективтілігі мен механикалық беріктігіне әсер етеді. Ол келесі формула бойынша есептеледі:

Мұндағы ρ – су тығыздығы (0,998 г/см³), l – мембрана қалыңдығы (см), A – мембрана ауданы (см²).

$$\epsilon (\%) = \left(\frac{W_m - W_d}{Al\rho} \right) \cdot 100.$$

Мембраналардың антифулингтік қасиеттері

Мембраналардың антифулингтік қасиеттері олардың ластануға төзімділігін және тазартудан кейін ағынды қалпына келтіру мүмкіндігін анықтайды:

Мұндағы J_{f1} – таза судың бастапқы ағыны (л·м⁻²·сағ⁻¹), J_b – ластаушы зат сүзілгеннен кейінгі ағын (л·м⁻²·сағ⁻¹), J_{f2} – мембрананы жұғаннан кейінгі ағын (л·м⁻²·сағ⁻¹).

Ағынды қалпына келтіру коэффициенті (FRR):

$$FRR(\%) = \left(\frac{J_{f2}}{J_{f1}} \right) \cdot 100.$$

Қайтымды ластану (R_r):

$$R_r(\%) = \left(\frac{J_{f2} - J_b}{J_{f1}} \right) \cdot 100.$$

Қайтымсыз ластану (R_{ir}):

$$R_{ir}(\%) = \left(\frac{J_{f1} - J_{f2}}{J_{f1}} \right) \cdot 100.$$

Жалпы ластану коэффициенті (R_t):

$$R_t(\%) = \left(\frac{J_{f1} - J_b}{J_{f1}} \right) \cdot 100.$$

Композитті мембраналардың селективтілігі

Композитті мембраналардың бөлу тиімділігі мембраналық сүзуде қолданылатын стандартты әдістер арқылы бағалануы мүмкін. Осындай әдістердің бірі – еріген заттың ауытқу коэффициенті (R) мен пермеат ағынын (J_p) есептеу.

Ауытқу коэффициенті (R) мембрананың органикалық қосылыстарды, бояғыштарды немесе ауыр металдардың иондарын қаншалықты тиімді ұстап қалатынын анықтауға мүмкіндік береді. Бұл көрсеткіш бастапқы ерітіндідегі (C_f) және пермеаттағы (C_p) зат концентрациялары негізінде есептеледі, яғни мембрананың бөлу қабілетін сандық түрде сипаттайды:

$$R(\%) = \left(1 - \frac{C_p}{C_f} \right) \cdot 100.$$

Пермеат ағыны (J_p) мембрананың өткізгіштік қасиеттерін сипаттайды және белгілі бір уақыт ішінде оның беті арқылы өтетін сұйықтық көлемін өлшеу арқылы анықталады:

$$J_p = \frac{V}{A \cdot \Delta t}$$

Мұнда V – пермеат көлемі (л), A – мембрананың тиімді ауданы (м²), Δt – сынақ уақыты (сағат).

Осындай әдістер мембраналық технологияларды зерттеуде кеңінен қолданылады, түрлі мембраналардың суды ластаушы заттардан тазарту тиімділігін салыстыруға мүмкіндік береді [61]. 2-кестеде әртүрлі ластаушы заттарды бөлуге арналған композитті мембраналардың сүзу өнімділігі мен селективтілігіне қатысты әдеби деректер негізінде салыстырмалы талдау ұсынылған.

МХене және наноцеллюлоза негізіндегі композитті мембраналардың тиімділігін сипаттау үшін тек сандық көрсеткіштермен шектелу жеткіліксіз. Су сіңіргіштік, кеуектілік, ластануға қарсы тұрақтылық немесе бояғыштар мен тұздарға селективтілік сияқты параметрлер маңызды болғанымен, олардың артындағы негізгі механизмдерді де түсіндіру қажет.

Ti₃C₂T_x (MXene) полиамидті активті қабатқа межелік полимеризация әдісі арқылы енгізілген кезде, мембрананың бетінде көпіршік тәрізді ерекше морфология қалыптасады. Бұл құрылым тиімді өтімді ауданның артуына ықпал етеді. Соның нәтижесінде су ағыны шамамен 45 л·м⁻²·сағ⁻¹·бар⁻¹-ге жетіп, бастапқы полиамидті мембранамен салыстырғанда 1,58 есеге жоғарылайды. Сонымен бірге, мембрана жоғары селективтілігін сақтап қалады: бояғыштар мен тұздарды бөлу коэффициенті шамамен 820-ға тең [69].

МХЕНЕ ЖӘНЕ НАНОЦЕЛЛЮЛОЗА НЕГІЗІНДЕГІ КОМПОЗИТТІ МЕМБРАНАЛАР: ҚАСИЕТТЕРІ ЖӘНЕ СУДЫ ТАЗАЛАУДАҒЫ ТИІМДІЛІГІ

2 – кесте. Әртүрлі ластаушы заттарды бөлуге арналған композитті мембраналардың өнімділігін салыстыру

№	Мембрана құрамы	Ластаушы зат	Өтімділік (л·м ⁻² ·сағ ⁻¹ ·бар ⁻¹)	Ағынды қалпына келтіру коэф. (%)	Бөлу тиімділігі (%)	Дереккөз
1	PSF/MXene	BSA	450	76,1	>90	[59]
2	MXene (Ti ₃ C ₂ T _x)	MG, BSA	—	67,3	99,49	[60]
3	Ti ₃ C ₂ T _x (MXene) / целлюлоза ацетаты	<i>E. coli</i> , <i>B. subtilis</i>	256,85	—	98	[61,62]
4	Нанокеллюлоза негізіндегі композиттік мембрана	Ag ⁺ , Cu ²⁺ , Fe ³⁺	900<	—	Ag ⁺ : ~100%, Cu ²⁺ : 74–86%, Fe ³⁺ : 74–86%	[63]
5	PES / Цвиттерион-MXene	BSA	480	94	90	[64]
6	MXene / керамикалық негіз	гумин қышқылы	331,9	—	86,5	[65]
7	PSF / Fe ₃ O ₄ / GO	гумин қышқылы	25,5	—	96,5	[66]
8	PAN / ZnO-NPs	Mn ⁷⁺	136,3	87,4	96,21	[67]
9	PES / мезокеуекті Si	Cd ²⁺ , Zn ²⁺	~80,20	—	91,94	[68]

MXene-нің электрөткізгіштігі мен гидрофильділігі мембрана бетінде тұрақты гидраттық қабат түзілуіне жағдай жасайды. Бұл қабат фулингтің алдын алады. Ультрасүзгіш тәжірибелері көрсеткендей, теріс электрлік потенциалды (2 В) қолдану пермеат ағынын 1,6 есеге арттырған. Сонымен қатар, органикалық көміртек бөлу тиімділігі 60,7%-дан 71,2%-ға дейін өскен. Мұндай нәтиже ластаушы бөлшектердің электростатикалық тебілуінің күшеюімен байланысты [70].

Химиялық тұрақтылық та маңызды артықшылық болып табылады. MXene қосылған жұқа қабатты нанокомпозитті мембраналар хлорлау немесе рН өзгерісі сияқты агрессивті жағдайларда да құрылымдық тұтастығын және сүзу қасиеттерін сақтайды [71]. Мысалы, Natu және әріптестері Ti₃C₂T_x сулы суспензиялары бейтарап ортада салыстырмалы түрде тұрақты екенін анықтаған. Ал рН 5 және рН 10 жағдайында айтарлықтай агрегация байқалған, бұл оның қышқылдық және сілтілік ортаға сезімталдығын дәлелдейді [72]. Тағы бір зерттеуде MXene енгізілген наносүзгіш мембраналар 105 күн үздіксіз суда қолданылғаннан кейін де Na₂SO₄-ты 98%-дан жоғары деңгейде ұстап тұрғаны көрсетілген. Бұл олардың ұзақ мерзімді сүзуге тұрақтылығын дәлелдейді [73].

Композитті мембрана құрамындағы нанокеллюлоза MXene қабаттарының агрегациясын болдырмайтын тұрақтандырғыш матрица қызметін атқарады. Сондай-ақ, ол берік межелік әрекеттесу арқылы мембранадағы ақауларды жабады. Мұндай синергиялық әсер механикалық беріктікті, селективтілікті және ұзақ мерзімді ластануға қарсы тұрақтылықты арттырады [74].

Сонымен қатар, нанокеллюлоза экологиялық таза әрі жаңартылатын табиғи биополимер ретінде ерекше маңызға ие. Оның айқын гидрофильділігі мембрананың суланғыштығын жоғарылатып, су ағынының тұрақты болуын қамтамасыз етеді [75]. Гидроксил топтарының көп болуы химиялық функционализацияға мүмкіндік беріп, мембрананың селективтілігі мен химиялық тұрақтылығын күшейтеді [76]. Бұдан басқа, нанокеллюлоза матрицасы

композиттің механикалық беріктігін арттырып, ұзақ мерзімді жұмыс істеу қабілетін қамтамасыз етеді [77].

MXene және нанокеллюлоза негізіндегі композитті мембраналар жоғары тиімділікті көрсетеді, алайда олардың толық потенциалын бағалау үшін тек сандық көрсеткіштерге емес, механикалық беріктілік, селективтілік және ластануға қарсы тұрақтылық сияқты қосымша қасиеттерге де назар аудару қажет. MXene қабатының гидрофильділігі мен электрөткізгіштігі судың ағынын арттырып, беттік ластанудың алдын алады, бұл ұзақ мерзімді қолдануда мембрананың жұмыс өнімділігін сақтауға мүмкіндік береді.

Нанокеллюлозаның экологиялық таза және гидрофильді табиғаты судың мембрананы біркелкі сулануына ықпал етіп, ұзақ мерзімді жұмысқа мүмкіндік береді. Сонымен қатар, оның химиялық функционализацияға бейімділігі мембрананың селективтілігін және химиялық тұрақтылығын арттырады, бұл әртүрлі ластаушы заттарды тиімді сүзуге жағдай жасайды. Осылайша, MXene мен нанокеллюлозаның синергиялық әсері мембрананың гидродинамикалық, механикалық және химиялық қасиеттерін үйлестіріп, оның практикалық қолданудағы сенімділігін арттырады.

Қорыта айтқанда, MXene-нанокеллюлоза композиттері тек сандық көрсеткіштермен емес, микро-және нано-деңгейдегі механизмдер арқылы да жоғары тиімділікті қамтамасыз етеді, бұл олардың су тазарту саласында кеңінен қолданылу потенциалын айқындайды.

3 МХЕНЕ ЖӘНЕ НАНОЦЕЛЛЮЛОЗА НЕГІЗІНДЕГІ КОМПОЗИТТІ МЕМБРАНАЛАР

3.1 Мембраналарды алу әдістері

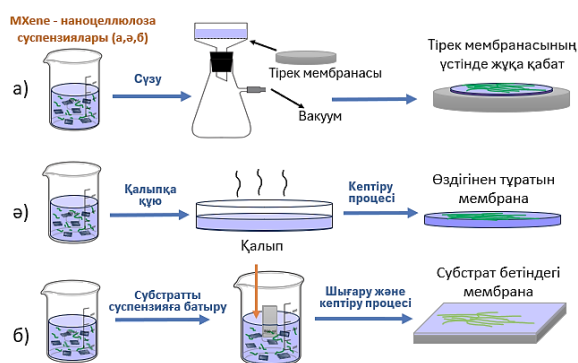
Вакуумдық сүзу

Вакуумдық сүзу және одан кейінгі ыстық престеу – қабатты нанокеллюлозалық мембраналық сүзгіштерді алудың жылдам, қарапайым және қолжетімді әдісі. Мұндай мембраналардың қалыңдығы мен кеуектерінің мөлшерін нанокеллюлоза суспензиясының концентрациясы мен мөлшерін өзгерту арқылы

реттеуге болады [78]. Бұл әдістің тиімділігі оның көпфункционалды сипатымен байланысты: вакуум сүзгілеу барысында наноцеллюлоза талшықтары тығыз орналасады, ал кейінгі ыстық престоу олардың байланысын күшейтіп, механикалық беріктігін арттырады. Осылайша, алынған мембраналар түрлі қолдану салаларына, соның ішінде су тазарту, биомедициналық жабындар мен катализдік процестерге бейімделе алады.

Ерітіндіден құю және сұйыққа батыру әдісі

Өзін-өзі ұстап тұратын мембраналар әдетте Петри табақшасында сұйылтылған наноцеллюлоза суспензиясын буландыру арқылы алынады. Агломерацияның алдын алу үшін дисперсия концентрациясын мүмкіндігінше төмендету қажет. Бұл көрсеткіш беткі химиялық құрам мен талшық диаметріне байланысты болғанымен, әдетте 1 масс% аспайды [78]. 3-ші суретте мембраналарды қалыптау әдістері көрсетілген.



3-сурет. Композиттік мембрана алудың негізгі әдістері: вакуумдық сүзу әдісі (а); ерітіндіден құю әдісі (б); сұйыққа батыру әдісі (в)

Мұндай әдіс өте қарапайым болғанымен, оның белгілі бір шектеулері бар. Біріншіден, булану процесі ұзақ уақытты қажет етеді, бұл өндірістік масштабта тиімділікті төмендетуі мүмкін. Екіншіден, алынған мембраналардың біртектілігі дисперсияның бастапқы жағдайына және булану жылдамдығына тәуелді. Дегенмен, бұл әдіс жоғары мөлдірлікке ие жұқа мембраналарды алу үшін тиімді болып табылады, сондықтан ол оптикалық құрылғылар мен сенсорлық жабындар өндірісінде ерекше қызығушылық тудырады.

3.2 Композитті мембраналарда MXene және наноцеллюлоза рөлі

Соңғы жылдары наноцеллюлоза (ФНЦ, КНЦ) мен MXene негізіндегі композиттер мембраналық технология саласында ерекше қызығушылық тудырады. Бұл екі материалдың синергетикалық үйлесімі олардың жеке шектеулерін толықтырып, механикалық беріктігі жоғары, электрөткізгіш, икемді әрі экологиялық тұрғыда тұрақты жаңа мембраналар алуға мүмкіндік береді [79].

Наноцеллюлозаның гидроксил топтарының көп болуы оған жоғары гидрофильділік береді, бұл суды

және полярлы ерітінділерді жақсы сіңіруге ықпал етеді. Алайда, таза күйінде наноцеллюлозадан алынған мембраналар артық ісінуге бейім және механикалық тұрақтылығы төмен болуы мүмкін. Осыған байланысты зерттеушілер наноцеллюлозаны MXene қабаттарымен біріктіріп, суды өткізу қабілеті мен механикалық қасиеттерін оңтайландыруға қол жеткізді [80]. ТЕМПО-тотықтырылған ФНЦ пен MXene негізінде дайындалған мембраналардың созылу беріктігі 171 МПа-ға жетіп, ион өткізгіштігі $4 \cdot 10^{-3} \text{ См} \cdot \text{см}^{-1}$ көрсеткен. Мұндай нәтижелер осмотикалық энергияны түрлендіруде жоғары тиімділікті көрсетті [81].

MXene, КНЦ және күміс негізіндегі жеңіл әрі икемді композитті мембраналар әзірленді. Олар «кірпіш тәрізді» құрылымға ие болып, электромагниттік кедергілерге қарсы жоғары тиімділікті қамтамасыз етеді. MXene бетінде күміс нанобөлшектерінің өздігінен қалпына келуі және мембрананың құрылымы арқасында олардың электромагниттік экрандау тиімділігі ≈ 50 дБ-қа жетеді, бұл күміссіз мембраналардың көрсеткішінен (≈ 15 дБ) едәуір жоғары. Мембраналар жұқа (46 мкм), созылуға төзімділігі жоғары (32 МПа-ға дейін) және жақсы электрөткізгіштікке ($588 \text{ См} \cdot \text{м}^{-1}$) ие [82]. Сонымен қатар, MXene және гемицеллюлоза негізіндегі биоинспириленген композиттік пленкалардың беріктік шегі 135 МПа-ға дейін жетіп, электрөткізгіштігі $739 \text{ См} \cdot \text{м}^{-1}$ шамасында болған [83].

Зерттеулер көрсеткендей, MXene және наноцеллюлоза негізіндегі композиттерді түрлі тәсілдермен модификациялау олардың қасиеттерін айтарлықтай жақсарты алады. Мысалы, лигнинмен модификацияланған гидротермиялық наноцеллюлоза және MXene қабаттары біріктірілген құрылымда механикалық беріктік 258 МПа-ға жеткен, ал электрөткізгіштігі $1,75 \cdot 10^5 \text{ См} \cdot \text{м}^{-1}$ деңгейінде тіркелген [84]. Мұндай көрсеткіштер бұл материалдарды икемді суперконденсаторларда қолдануға жол ашады.

Сондай-ақ, MXene-ФНЦ композиттері суперконденсатор электродтары мен сенсорларда тиімді қолданылып жүр. Мысалы, MXene/ФНЦ/полианилин жұқа қабатының өткізгіштігі $634 \text{ См} \cdot \text{см}^{-1}$ болып, 2000 циклдан кейін бастапқы сыйымдылығының 94%-ын сақтап қалған [85]. Ал КНЦ негізіндегі MXene ультражұқа пленкалары шамамен 57 МПа беріктікке және $10^4 \text{ См} \cdot \text{м}^{-1}$ электрөткізгіштікке қол жеткізіп, электромагниттік кедергілерді 40 дБ-ден жоғары деңгейде экрандауға қабілетті болған [86].

Әдеби деректер көрсеткендей, бұл материалдардың синергетикалық үйлесімі механикалық беріктілікті, электрөткізгіштікті және суды өткізу қабілетін арттыруға мүмкіндік береді. Сонымен қатар, түрлі функционализация әдістерін қолдану арқылы олардың қасиеттерін одан әрі жақсартуға болады. Мұндай композиттер болашақта су тазарту жүйелері, суперконденсаторлар, сенсорлық құрылғылар және электромагниттік қорғау салаларында тиімді қолданылуы мүмкін.

4 ПЕРСПЕКТИВАЛАР МЕН БОЛАШАҚ БАҒЫТТАР **Өзін-өзі қалпына келтіретін және өзін-өзі** **тазартатын мембраналар**

Соңғы жылдары МХене және наноцеллюлоза негізіндегі композиттерге ерекше назар аударылуда, себебі олардың бірегей құрылымдық қасиеттері мембраналардың ұзақ мерзімділігін және тұрақтылығын арттыруға мүмкіндік береді. Хіа және әріптестері жоғары механикалық беріктікке ие, өзін-өзі қалпына келтіретін және өзін-өзі тазартатын супрамолекулярлы талшықты мембрананы әзірледі [87]. Pantuso және т.б. динамикалық гибриді мембраналардың ластануға қарсы тұру және өзін-өзі тазарту қабілеттерін көрсетті [88]. Бұл бағыттағы дамулар МХене мен наноцеллюлозаны интеграциялау арқылы жаңа буын «ақылды» мембраналар құруға жол ашады [94].

Экологиялық қауіпсіз биоыдырайтын **мембраналарды әзірлеу**

Целлюлоза ацетатына негізделген наноталшықты мембраналар биоыдырайтын әрі экологиялық таза балама ретінде ерекше назарға ие [89]. Tang және әріптестері МХене/наноцеллюлоза композиттерін пайдаланып, механикалық беріктігі жоғары әрі биоыдырайтын пленкалар жасады [95]. Мұндай гибриді құрылымдар экологиялық тұрақтылықты қамтамасыз ете отырып, сүзгілеу және биомедициналық қолданбаларда тиімділікті арттыруға мүмкіндік береді. Сонымен қатар, жасыл еріткіштерді пайдалану арқылы уыттылықты азайту мембраналық технологиялардың тұрақты дамуына ықпал етеді.

Молекулалық жобалау және **функционалдылық**

Молекулалық деңгейде модельдеу мембраналардың селективтілігі мен өткізгіштігін басқаруда маңызды рөл атқарады. Wang және әріптестері органикалық молекулалық елек тәрізді мембраналардың күрделі қоспаларды жоғары селективтілікпен бөле алатынын көрсетті [90]. Shahbabaei және Tang кері осмосқа арналған жұқа қабатты нанокомпозитті мембраналарды молекулалық модельдеу арқылы оңтайландырды [91]. Жақында Ху және басқалары МХене/наноцеллюлоза мембраналарын атомдық деңгейде модельдеу арқылы олардың ион тасымалдау қасиеттерін жақсартудың жаңа тәсілдерін сипаттады [96].

МХене/наноцеллюлоза композитті **мембраналардың артықшылықтары**

Бұл материалдар жоғары өткізгіштікке, механикалық тұрақтылыққа және ластануға төзімділікке ие. Asif және Zhang керамикалық мембраналардың өнеркәсіптік қолданудағы рөлі мен олардың болашағын талқылады [92]. Issaoui және әріптестері мембраналық технологиялардың су ресурстарын тұрақты басқарудағы маңызын атап өтті [93]. Wang және әріптестері МХене/наноцеллюлоза композитті мембраналарының осмостық энергия өндірудегі әлеуетін көрсетті [97]. Бұл бағыттағы жұмыстар мембраналық

технологияларды ірі масштабта қолдануға мүмкіндік береді.

Болашақ бағыттар

МХене мен наноцеллюлозаға негізделген жаңа композиттер биомедицина, газ бөлінуі және энергия сақтау сияқты қосымша салаларда да қолданылуы мүмкін [98–100]. Сонымен қатар, ФНЦ-мен күшейтілген МХене мембраналарының тұрақтылығы мен ұзақ мерзімділігін арттыру мәселелері белсенді зерттелуде [101]. Жақында жарияланған шолулар МХене/наноцеллюлоза гидрогельдерінің сенсорлар мен икемді құрылғылардағы әлеуетін көрсетті [102]. Жалпы, инновациялық материалдардың комбинациясы және молекулалық жобалау әдістері болашақта мембраналық технологиялардың функционалдығын кеңейтуге және экологиялық тұрақтылығын қамтамасыз етуге мүмкіндік береді [103, 104].

ҚОРЫТЫНДЫ

Су тазалауға арналған заманауи мембраналар экологиялық тұрақты технологияларды дамытудың негізгі бағыттарының бірі болып табылады. Бұл шолу барысында МХене және наноцеллюлоза негізіндегі композитті мембраналардың құрылымдық ерекшеліктері мен функционалдық қасиеттері, сонымен қатар олардың су тазарту саласындағы артықшылықтары жан-жақты талданды.

МХене материалының гидрофильділігі мен беткі белсенділігі, сондай-ақ наноцеллюлозаның биологиялық ыдырағыштығы мен жоғары механикалық беріктігі композитті мембраналардың өнімділігін арттыруға мүмкіндік береді. Бұл материалдардың үйлесімі арқылы алынған мембраналар судың тұщытылуы, ауыр металл иондарын, органикалық ластанғыштар мен микростаттарды тиімді бөлу сияқты күрделі міндеттерді шешуге қабілетті.

Жинақталған ғылыми деректер көрсеткендей, МХене мен наноцеллюлоза негізіндегі композитті мембраналар болашақта экологиялық қауіпсіз және тиімді су тазалау жүйелерін дамытуда маңызды орын алуы мүмкін. Бұл бағыттағы зерттеулерді тереңдету мембраналардың ұзақ мерзімді тұрақтылығы мен практикалық қолдану мүмкіндігін кеңейтуге жол ашады.

Алғыс

Жұмыс Қазақстан Республикасы Ғылым және жоғары білім министрлігінің Ғылым комитетінің, BR24992814 «Оңтүстік Қазақстан облысының тұрақты дамуы үшін инновациялық технологияларды дамыту және заманауи инфрақұрылым құру» қолдауымен орындалды.

ӘДЕБИЕТТЕР / REFERENCES

1. Abdelhamid, H. N. Nanocellulose-based materials for water pollutant removal: A review // International Journal of Molecular Sciences. – 2024. – Vol. 25(15). – P. 8529. <https://doi.org/10.3390/ijms25158529>

2. Liu, Y., Liu, H., & Shen, Z. Nanocellulose based filtration membrane in industrial waste water treatment: a review // *Materials*. – 2021. – Vol. 14(18). – P. 5398. <https://doi.org/10.3390/ma14185398>
3. Varghese, R. T., Cherian, R. M., Antony, T., Tharayil, A., Das, H., Kargarzadeh, H., & Thomas, S. A review on the best bioadsorbent membrane-nanocellulose for effective removal of pollutants from aqueous solutions // *Carbohydrate Polymer Technologies and Applications*. – 2022. – Vol. 3. – P. 100209. <https://doi.org/10.1016/j.carpta.2022.100209>
4. Huang, L., Ding, L., Caro, J., & Wang, H. MXene-based membranes for drinking water production // *Angewandte Chemie International Edition*. – 2023. <https://doi.org/10.1002/anie.202311138>
5. AlHadithy, Z.E., AbdulRazak, A.A., Al-Ghaban, A.M.H.A. et al. Advancements in Water Treatment with MXene-Enhanced Membranes: A Review of Current Progress and Future Directions // *Water Air Soil Pollut.* – 2024. <https://doi.org/10.1007/s11270-024-07628-x>
6. Sun, Y., Lu, J., Li, S., Dai, C., Zou, D., & Jing, W. MXene-based membranes in water treatment: Current status and future prospects // *Separation and Purification Technology*. – 2024. <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2023.125640>
7. Zubair, M., Yasir, M., Ponnammma, D., Mazhar, H., Sedlarik, V., Hawari, A. H., ... & Al-Ejji, M. Recent advances in nanocellulose-based two-dimensional nanostructured membranes for sustainable water purification: A review. // *Carbohydrate Polymers*. – 2024. <https://doi.org/10.1016/j.carbpol.2024.121775>
8. Iqbal, D., Zhao, Y., Zhao, R., Russell, S. J., & Ning, X. A review on nanocellulose and superhydrophobic features for advanced water treatment // *Polymers*. – 2022. <https://doi.org/10.3390/polym14122343>
9. Al-Hamadani, Y. A., Jun, B. M., Yoon, M., Taheri-Qazvini, N., Snyder, S. A., Jang, M., ... & Yoon, Y. Applications of MXene-based membranes in water purification: A review // *Chemosphere*. – 2020. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2020.126821>
10. Hong, S., Al Marzooqi, F., El-Demellawi, J. K., Al Marzooqi, N., Arafat, H. A., & Alshareef, H. N. Ion-selective separation using MXene-based membranes: a review // *ACS Materials Letters*. – 2023. – Vol. 5(2). – P. 341–356. <https://doi.org/10.1021/acsmaterialslett.2c00914>
11. Meskher, H., Thakur, A., Hazra, S. K., Ahamed, M. S., Saleque, A. M., Alsahly, Q. F., ... & Lynch, I. Recent advances in applications of MXenes for desalination, water purification and as an antibacterial: a review // *Environmental Science: Nano*. – 2025. <https://doi.org/10.1039/D4EN00427B>
12. Liu, J., Zhao, Z., Xu, R., Wang, Y., Wang, X., & Tan, F. Sulfhydryl functionalized two-dimensional $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{Tx}$ MXene for efficient removal of Hg^{2+} in water samples // *Journal of Hazardous Materials*. – 2024. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2024.135205>
13. Daulbayev, C., Nursharip, A., Tauanov, Z., Busquets, R., & Baimenov, A. Mechanisms of mercury removal from water with highly efficient MXene and silver-modified polyethyleneimine cryogel composite filters // *Advanced Composites and Hybrid Materials*. – 2024. <http://dx.doi.org/10.1007/s42114-024-00945-z>
14. Wang, X., Wang, R., Xu, Y., & Wei, G. Recent advances in biohybrid membranes for water treatment: Preparation strategies, nano-hybridization, bioinspired functionalization, applications, and sustainability analysis // *Journal of Materials Chemistry A*. – 2025. <https://doi.org/10.1039/D5TA04214C>
15. Vo, T.S., Lwin, K.M. & Kim, K. Recent developments of nano-enhanced composite membranes designed for water/wastewater purification – a review // *Adv. Compos. Hybrid Mater.* – 2024. – Vol. 7. – P. 127. <https://doi.org/10.1007/s42114-024-00923-5>
16. Tiwary, S.K., Singh, M., Chavan, S.V. et al. Graphene oxide-based membranes for water desalination and purification // *npj 2D Mater. Appl.* – 2024. – Vol. 8. – P. 27. <https://doi.org/10.1038/s41699-024-00462-z>
17. Santhamoorthy, M., Asaithambi, P., Perumal, I., Elangovan, N., Natarajan, P., Lin, M. C. & Phan, T. T. V. A comprehensive review of the functionalized polymer composite membranes in wastewater treatment // *Journal of Environmental Chemical Engineering*. – 2025. – Vol. 13(5). – P. 117735. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jece.2025.117735>
18. J. Jimmy and B. Kandasubramanian, Mxene functionalized polymer composites: Synthesis and applications // *Eur Polym J*. – 2020. <https://doi.org/10.1016/j.eurpolymj.2019.109367>
19. R. Ohno, K. Shudo, T. Tano, and K. Kakinuma, Development of Polymer Composite Membranes with Hydrophilic TiO_2 Nanoparticles and Perfluorosulfonic Acid-Based Electrolyte for Polymer Electrolyte Fuel Cells Operating over a Wide Temperature Range // *ACS Appl Energy Mater.* – 2023. <https://doi.org/10.1021/acsaem.3c01721>
20. Liu, S., Han, X., Hua, J., Zhang, Y., Gao, Y., Daigger, G. T. & Song, G. Graphene oxide-based composite membranes: Antifouling mechanisms, functionalization strategies, and applications in refractory wastewater treatment // *Separation and Purification Technology*. – 2025. <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2025.134416>
21. Choi, Jong Soo, et al. A review of metal–organic framework-based membranes for the removal of emerging contaminants from water // *Journal of Water Process Engineering*. – 2024. <https://doi.org/10.1016/j.jwpe.2024.106456>
22. Liu, R., Sui, Y., & Wang, X. Metal–organic framework-based ultrafiltration membrane separation with capacitive-type for enhanced phosphate removal // *Chemical Engineering Journal*. – 2019. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2019.04.136>
23. Motshekga, S.C., Oyewo, O.A. & Makgato, S.S. Recent and Prospects of Synthesis and Application of Metal-Organic Frameworks (MOFs) in Water Treatment: A Review // *J Inorg Organomet Polym.* – 2024. <https://doi.org/10.1007/s10904-024-03063-x>
24. R. Pathak, M. Punetha, S. Bhatt, S. A. Pillai, P. S. Dhapola, and V. D. Punetha, Organic and inorganic nanofillers for polymer nanocomposites // *Advances in Functionalized Polymer Nanocomposites*. – Elsevier. – 2024. <https://doi.org/10.1016/B978-0-443-18860-2.00003-7>
25. S. Xue et al. Nanostructured Graphene Oxide Composite Membranes with Ultraperviousness and Mechanical Robustness. – 2020. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.9b03780>
26. Razmjou, A., Asadnia, M., Hosseini, E. et al. Design principles of ion selective nanostructured membranes for the extraction of lithium ions // *Nat Commun.* – 2019. <https://doi.org/10.1038/s41467-019-13648-7>
27. Oviroh, P. O., Jen, T. C., Ren, J., Mohlala, L. M., Warmbier, R., & Karimzadeh, S. Nanoporous MoS_2

- membrane for water desalination: a molecular dynamics study // *Langmuir*. – 2021.
<https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.1c00708>
28. Henmi, M., Nakatsuji, K., Ichikawa, T., Tomioka, H., Sakamoto, T., Yoshio, M., & Kato, T. Self-organized liquid-crystalline nanostructured membranes for water treatment: selective permeation of ions // *Advanced Materials*. – 2012.
<https://doi.org/10.1002/adma.201200108>
29. H. Oh et al. Approaching Ideal Selectivity with Bioinspired and Biomimetic Membranes // *ACS Nano*. – 2025,
<https://doi.org/10.1021/acsnano.4c09699>
30. Friess K, Izák P, Kárászová M, Pasichnyk M, Lanč M, Nikolaeva D, Luis P, Jansen JC. A Review on Ionic Liquid Gas Separation Membranes // *Membranes*. – 2021;
<https://doi.org/10.3390/membranes11020097>
31. R. F. M. Elshaarawy, R. M. Abd El-Aal, F. H. A. Mustafa, A. E. Borai, S. Schmidt, and C. Janiak, Dual ionic liquid-based crosslinked chitosan for fine-tuning of antifouling, water throughput, and denitrification performance of polysulfone membrane // *Int J Biol Macromol*. – 2021.
<https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2020.12.186>
32. Radu, E.R.; Voicu, S.I.; Thakur, V.K. Polymeric Membranes for Biomedical Applications // *Polymers*. – 2023. <https://doi.org/10.3390/polym15030619>
33. Karki, S., Hazarika, G., Yadav, D., & Ingole, P. G. Polymeric membranes for industrial applications: Recent progress, challenges and perspectives // *Desalination*. – 2024. <https://doi.org/10.1016/j.desal.2023.117200>
34. Hazarika, B., Ahmaruzzaman, M., Santosh, M. S., Barceló, D., & Rtimi, S. Advances in polymer-based nanocomposite membranes for water remediation: Preparation methods, critical issues and mechanisms // *Journal of Environmental Chemical Engineering*. – 2023. <https://doi.org/10.1016/j.jece.2023.111401>
35. Y. A. Ghodke, N. Mayilswamy, and B. Kandasubramanian, Polyamide (PA)- and Polyimide (PI)- based membranes for desalination application // *Polymer Bulletin*. – 2023. <https://doi.org/10.1007/s00289-022-04559-7>
36. N. Li et al. MXene-PANI/PES composite ultrafiltration membranes with conductive properties for anti-fouling and dye removal // *J Memb Sci*. – 2023.
<https://doi.org/10.1016/j.memsci.2022.121271>
37. R. Wu, Y. Tan, F. Meng, Y. Zhang, and Y.-X. Huang, PVDF/MAF-4 composite membrane for high flux and scaling-resistant membrane distillation // *Desalination*. – 2022. <https://doi.org/10.1016/j.desal.2022.116013>
38. H. Zhao, D. Zhang, H. Sun, Y. Zhao, and M. Xie, Adsorption and detection of heavy metals from aqueous water by PVDF/ATP-CDs composite membrane // *Colloids Surf A Physicochem Eng Asp*. – 2022.
<https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2022.128573>
39. A. Spoială et al., Preparation and Characterization of Chitosan/TiO₂ Composite Membranes as Adsorbent Materials for Water Purification // *Membranes (Basel)*. – 2022. <https://doi.org/10.3390/membranes12080804>
40. T. F. Ajibade, H. Tian, K. Hassan Lasisi, Q. Xue, W. Yao, and K. Zhang, Multifunctional PAN UF membrane modified with 3D-MXene/O-MWCNT nanostructures for the removal of complex oil and dyes from industrial wastewater // *Sep Purif Technol*. – 2021.
<https://doi.org/10.1016/j.seppur.2021.119135>
41. Z.Liu et al., Electrospun PVDF/PAN membrane for pressure sensor and sodium-ion battery separator // *Adv Compos Hybrid Mater*. – 2021.
<https://doi.org/10.1007/s42114-021-00364-4>
42. M. Barrejón and M. Prato, Carbon Nanotube Membranes in Water Treatment Applications // *Adv Mater Interfaces*. – 2022. <https://doi.org/10.1002/admi.202101260>
43. Z. Jin, Q. Chen, Y. Shen, X. Chen, M. Qiu, and Y. Fan, Construction of TiO₂-ZrO₂ composite nanofiltration membranes for efficient selective separation of dyes and salts // *Sep Purif Technol*. – 2024.
<https://doi.org/10.1016/j.seppur.2024.128127>
44. Long W., Chen Z., Shi J., Yang S. Efficient Removal of Cr(VI) Ions in Petrochemical Wastewater Using Fe₃O₄@Saccharomyces cerevisiae Magnetic Nanocomposite // *Nanomaterials*. – 2022. <https://www.mdpi.com/2079-4991/12/18/3250>
45. Li H., Hua J., Li R., Zhang Y., Jin H., Wang S., Chen G. Application of Magnetic Nanocomposites: Core-Shell Fe₃O₄ Material for Efficient Adsorption of Cr(VI) // *Water*. – 2023. <https://www.mdpi.com/2073-4441/15/15/2827>
46. Zhou W., Wang Y., Zhang J., Zhang Y., et al. Xanthate-Modified Magnetic Fe₃O₄@SiO₂-Based Polyvinyl Alcohol/Chitosan Composite Material for Efficient Removal of Heavy Metal Ions from Water // *Polymers*. – 2022. <https://www.mdpi.com/2073-4360/14/6/1107>
47. R. Mahdavi Far, B. Van der Bruggen, A. Verliefde, and E. Cornelissen, A review of zeolite materials used in membranes for water purification: history, applications, challenges and future trends // *Journal of Chemical Technology & Biotechnology*. – 2022.
<https://doi.org/10.1002/jctb.6963>
48. Z.-K. Tan, J.-L. Gong, S.-Y. Fang, J. Li, W.-C. Cao, and Z.-P. Chen, Outstanding anti-bacterial thin-film composite membrane prepared by incorporating silver-based metal-organic framework (Ag- MOF) for water treatment // *Appl Surf Sci*. – 2022.
<https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2022.153059>
49. Jasim, H. K., Al-Ridah, Z. A., & Naje, A. S. Graphene oxide-carbon nanotube composite membrane for enhanced removal of organic pollutants by forward osmosis // *Desalination and Water Treatment*. – 2024. <https://doi.org/10.1016/j.dwt.2024.100363>
50. Kirk, C. H., Wang, P., Chong, C. Y. D., Zhao, Q., Sun, J., & Wang, J. TiO₂ photocatalytic ceramic membranes for water and wastewater treatment: Technical readiness and pathway ahead // *Journal of Materials Science & Technology*. – 2024. <https://doi.org/10.1016/j.jmst.2023.09.05>
51. Kumari, S., Chowdhry, J., Kumar, M., & Garg, M. C. Zeolites in wastewater treatment: A comprehensive review on scientometric analysis, adsorption mechanisms, and future prospects // *Environmental Research*. – 2024. <https://doi.org/10.1016/j.envres.2024.119782>
52. Ajith, S., Almomani, F., & Qiblawey, H. Emerging 2D MXene-based polymeric membranes for water treatment and desalination // *Journal of Environmental Chemical Engineering*. – 2024.
<https://doi.org/10.1016/j.jece.2024.112078>
53. Rodrigues, A. S., Batista, J. G., Rodrigues, M. Á., Thipe, V. C., Minarini, L. A., Lopes, P. S., & Lugão, A. B. Advances in silver nanoparticles: a comprehensive review on their potential as antimicrobial agents and their mechanisms of action elucidated by proteomics // *Frontiers in Microbiology*. – 2024.
<https://doi.org/10.3389/fmicb.2024.1440065>

54. Chamam, B., Ben Dassi, R., Abderraouf, J., Mericq, J. P., Faur, C., Trabelsi, I., ... & Heran, M. Incorporation of Ag-ZnO Nanoparticles into PVDF Membrane Formulation to Enhance Dye Retention, Permeability, and Antibacterial Properties // *Polymers*. – 2025. <https://doi.org/10.3390/polym17091269>
55. Xu, T., Qu, R., Zhang, Y., Sun, C., Wang, Y., Kong, X & Ji, C. Amino-Thiol Bifunctional Polysilsesquioxane/Carbon Nanotubes Magnetic Composites as Adsorbents for Hg (II) Removal // *Frontiers in Environmental Chemistry*. – 2021. <https://doi.org/10.3389/fenvc.2021.706254>
56. V. P. Kothavale et al., Carboxyl and thiol-functionalized magnetic nanoadsorbents for efficient and simultaneous removal of Pb(II), Cd(II), and Ni(II) heavy metal ions from aqueous solutions: Studies of adsorption, kinetics, and isotherms // *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. – 2023. <https://doi.org/10.1016/j.jpcs.2022.111089>
57. S. M. Waly, A. M. El-Wakil, W. M. A. El-Maaty, and F. S. Awad, Efficient removal of Pb(II) and Hg(II) ions from aqueous solution by amine and thiol modified activated carbon // *Journal of Saudi Chemical Society*. – 2021. <https://doi.org/10.1016/j.jscs.2021.101296>
58. Y. Zhang et al. Research progress of adsorption and removal of heavy metals by chitosan and its derivatives: A review // *Chemosphere*. – 2021. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2021.130927>
59. Z. Shen et al., Fabrication of a Novel Antifouling Polysulfone Membrane with in Situ Embedment of Mxene Nanosheets // *Int J Environ Res Public Health*. – 2019. <https://doi.org/10.3390/ijerph16234659>
60. Azam, R. S., Almasri, D. A., Alfahel, R., Hawari, A. H., Hassan, M. K., Elzatahry, A. A., & Mahmoud, K. A. MXene (Ti₃C₂T_x)/cellulose acetate mixed-matrix membrane enhances fouling resistance and rejection in the crossflow filtration process // *Membranes*. – 2022. <https://doi.org/10.3390/membranes12040406>
61. Pandey, R. P., Rasheed, P. A., Gomez, T., Azam, R. S., & Mahmoud, K. A. A fouling-resistant mixed-matrix nanofiltration membrane based on covalently cross-linked Ti₃C₂T_x (MXene)/cellulose acetate. *Journal of Membrane Science*. – 2020. – Vol. 607. – P. 118139. <https://doi.org/10.1016/j.memsci.2020.118139>
62. I. Ounifi et al., Antifouling Membranes Based on Cellulose Acetate (CA) Blended with Poly(acrylic acid) for Heavy Metal Remediation // *Applied Sciences*. – 2021. <https://doi.org/10.3390/app11104354>
63. Karim, Z., Mathew, A. P., Kokol, V., Wei, J., & Grahm, M. High-flux affinity membranes based on cellulose nanocomposites for removal of heavy metal ions from industrial effluents // *RSC Advances*. – 2016. <https://doi.org/10.1039/C5RA27059F>
64. P. Kallem, N. Elashwah, G. Bharath, H. M. Hegab, S. W. Hasan, and F. Banat, Zwitterion-Grafted 2D MXene (Ti₃C₂T_x) Nanocomposite Membranes with Improved Water Permeability and Self- Cleaning Properties // *ACS Appl Nano Mater*. – 2023. <https://doi.org/10.1021/acsanm.2c04722>
65. L. Qian et al., Conductive MXene ultrafiltration membrane for improved antifouling ability and water quality under electrochemical assistance // *RSC Adv*. – 2023. <https://doi.org/10.1039/D3RA01116J>
66. Chai, P. V., Mahmoudi, E., Teow, Y. H., & Mohammad, A. W. Preparation of novel polysulfone-Fe₃O₄/GO mixed-matrix membrane for humic acid rejection // *Journal of Water Process Engineering*. – 2017. <https://doi.org/10.1016/j.jwpe.2016.06.001>
67. A. Zahid et al., Enabling improved PSF nanocomposite membrane for wastewater treatment with selective nanotubular morphology of PANI/ZnO // *Mater Adv*. – 2024. <https://doi.org/10.1039/D4MA00859F>
68. A. A. Alotaibi, A. K. Shukla, M. H. Mrad, A. M. Alswieleh, and K. M. Alotaibi, Fabrication of Polysulfone-Surface Functionalized Mesoporous Silica Nanocomposite Membranes for Removal of Heavy Metal Ions from Wastewater // *Membranes (Basel)*. – 2021. <https://doi.org/10.3390/membranes11120935>
69. Wang, Y., Xu, H., Ding, M., Zhang, L., Chen, G., Fu, J., Wang, A., Chen, J., Liu, B., Yang, W. MXene-regulation polyamide membrane featuring bubble-like nodule for efficient dye/salt separation and antifouling performance // *RSC Advances*. – 2022. <https://doi.org/10.1039/D2RA00335J>
70. Qian, L., Yuan, C., Wang, X., Zhang, H., Du, L., Wei, G., Chen, S. Conductive MXene ultrafiltration membrane for improved antifouling ability and water quality under electrochemical assistance // *RSC Advances*. – 2023. <https://doi.org/10.1039/D3RA01116J>
71. Usman, J., Yogarathinam, L. T., Baig, N., Abba, S. I., Chrystie, R., & Aljundi, I. H. MXene-enhanced sulfonated TFN nanofiltration membranes for improved desalination performance // *Desalination*. – 2024. <https://doi.org/10.1016/j.desal.2024.117566>
72. Ganji, N., Reardon-Lochbaum, C. A., Ambade, S. B., Anastasia, C. M., Eckhart, P. M., Rosenzweig, Z. & Fairbrother, D. H. Stability of Ti₃C₂T_x MXenes in engineered environments // *Environmental Science: Nano*. – 2024. <https://doi.org/10.1039/D3EN00438D>
73. Xue, Q., & Zhang, K. The preparation of high-performance and stable MXene nanofiltration membranes with MXene embedded in the organic phase // *Membranes*. – 2021. <https://doi.org/10.3390/membranes12010002>
74. Zhang, Y., Li, S., Huang, R., He, J., Sun, Y., Qin, Y., & Shen, L. Stabilizing MXene-based nanofiltration membrane by forming analogous semi-interpenetrating network architecture using flexible poly (acrylic acid) for effective wastewater treatment // *Journal of Membrane Science*. – 2022. <https://doi.org/10.1016/j.memsci.2022.120360>
75. Solhi, L., Guccini, V., Heise, K., Solala, I., Niinivaara, E., Xu, W., ... & Kontturi, E. Understanding nanocellulose-water interactions: turning a detriment into an asset // *Chemical reviews*. – 2023. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.2c0061>
76. Jaffar, S.S.; Saallah, S.; Misson, M.; Siddiquee, S.; Roslan, J.; Saalah, S.; Lenggoro, W. Recent Development and Environmental Applications of Nanocellulose-Based Membranes // *Membranes*. – 2022. <https://doi.org/10.3390/membranes12030287>
77. Mbisana, M., Keroletswe, N., Naretsile, F. et al. Nanocellulose composites: synthesis, properties, and applications to wastewater treatment // *Cellulose* 31. – 2024. <https://doi.org/10.1007/s10570-024-06268-y>
78. Z. Dai, V. Ottesen, J. Deng, R. M. L. Helberg, and L. Deng, A Brief Review of Nanocellulose Based Hybrid Membranes for CO₂ // *Separation*. – 2019. <https://doi.org/10.3390/fib7050040>
79. Xu, T., Song, Q., Liu, K. et al. Nanocellulose-Assisted Construction of Multifunctional MXene-Based Aerogels

- with Engineering Biomimetic Texture for Pressure Sensor and Compressible Electrode // *Nano-Micro Lett.* – 2023. <https://doi.org/10.1007/s40820-023-01073-x>
80. Qin, Z., Chen, X., Lv, Y., Zhao, B., Fang, X., & Pan, K. Wearable and high-performance piezoresistive sensor based on nanofiber/sodium alginate synergistically enhanced MXene composite aerogel // *Chemical Engineering Journal.* – 2023. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2022.138586>
 81. Sun, Z., Ahmad, M., Gao, Z., Shan, Z., Xu, L., Wang, S., & Jin, Y. Highly ionic conductive and mechanically strong MXene/CNF membranes for osmotic energy conversion // *Sustainable Energy & Fuels.* – 2022. <https://doi.org/10.1039/D1SE01729B>
 82. Xin, W., Xi, G. Q., Cao, W. T., Ma, C., Liu, T., Ma, M. G., & Bian, J. Lightweight and flexible MXene/CNF/silver composite membranes with a brick-like structure and high-performance electromagnetic-interference shielding // *RSC advances.* – 2019. <https://doi.org/10.1039/C9RA06399D>
 83. Chen, R., Tang, H., Dai, Y., Zong, W., Zhang, W., He, G., & Wang, X. Robust bioinspired MXene–hemicellulose composite films with excellent electrical conductivity for multifunctional electrode applications // *ACS nano.* – 2022. <https://doi.org/10.1021/acsnano.2c08163>
 84. Chang, L., Peng, Z., Zhang, T., Yu, C., & Zhong, W. Nacre-inspired composite films with high mechanical strength constructed from MXenes and wood-inspired hydrothermal cellulose-based nanofibers for high performance flexible supercapacitors // *Nanoscale.* – 2021. <https://doi.org/10.1039/D0NR08090J>
 85. Yuan T, Zhang Z, Liu Q, Liu X.T, Miao Y.N, Yao C.L. MXene (Ti₃C₂T_x)/cellulose nanofiber/polyaniline film as a highly conductive and flexible electrode material for supercapacitors // *Carbohydr Polym.* – 2023. <https://doi.org/10.1016/j.carbpol.2022.120519>
 86. Liu, Z. S., Liu, J., Dai, Y., Li, X. F., Yu, Z. Z., & Zhang, H. B. Bioinspired ultrathin mxene/cnc composite film for electromagnetic interference shielding // *J. Inorg. Mater.* – 2020. <https://doi.org/10.15541/jim20190148>
 87. M. Xia et al., Bio-inspired high-strength supramolecular fiber membrane by ice-dissolving-regeneration for achieving self-healing, self-cleaning and water purification // *Chemical Engineering Journal.* – 2024. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2024.150023>
 88. E. Pantuso et al., Smart dynamic hybrid membranes with self-cleaning capability // *Nature Communications.* – 2023. <https://doi.org/10.1038/s41467-023-41446-9>
 89. D. G. Oldal, F. Topuz, T. Holtzl, and G. Szekely, Green Electrospinning of Biodegradable Cellulose Acetate Nanofibrous Membranes with Tunable Porosity // *ACS Sustainable Chemistry & Engineering.* – 2023. <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.2c05676>
 90. H. Wang et al., Organic molecular sieve membranes for chemical separations // *Chemical Society Reviews.* – 2021. <https://doi.org/10.1039/D0CS01347A>
 91. M. Shahbabaee and T. Tang, Molecular modeling of thin-film nanocomposite membranes for reverse osmosis water desalination // *PCCP.* – 2022. <https://doi.org/10.1039/D2CP03839K>
 92. M. B. Asif and Z. Zhang, Ceramic membrane technology for water and wastewater treatment // *Chemical Engineering Journal,* – 2021. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2021.129481>
 93. M. Issaoui et al., Membrane technology for sustainable water resources management: Challenges and future projections // *Sustainable Chemistry and Pharmacy.* – 2022. <https://doi.org/10.1016/j.scp.2021.100590>
 94. Lin, H., Wu, M., Zhao, Z., Zhang, F., Zhou, C., Yang, D., ... & Liang, L. Design of High-Performance MXene-Based 2D Membranes for Desalination via Machine Learning and Hybrid Optimization Algorithms // *ACS Applied Materials & Interfaces.* – 2025. <https://doi.org/10.1021/acsami.5c11202>
 95. S. Tang et al., Nacre-inspired biodegradable nanocellulose/MXene/AgNPs films // *Carbohydrate Polymers.* – 2023. <https://doi.org/10.1016/j.carbpol.2022.120204>
 96. Xu, Z., Zhu, B., Liu, X., Lan, T., Huang, Y., Zhang, Y., & Wu, D. High-performance electroionic artificial muscles boosted by superior ion transport with Ti₃C₂T_x MXene/Cellulose nanocomposites for advanced 3D-motion actuation // *Chemical Engineering Journal.* – 2023. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2023.147246>
 97. S. Wang, Z. Sun, M. Ahmad, and M. Miao, Fabrication of porous MXene/cellulose nanofiber composite membranes for osmotic energy harvesting // *IJMS.* – 2024. <https://doi.org/10.3390/ijms252313226>
 98. Ghilan, A., Nicu, R., Ciolacu, D. E., & Ciolacu, F. Insight into the latest medical applications of nanocellulose // *Materials.* – 2023. <https://doi.org/10.3390/ma16124447>
 99. Talipova, A. B., Buranych, V. V., Savitskaya, I. S., Bondar, O. V., Turlybekuly, A., & Pogrebnjak, A. D. Synthesis, properties, and applications of nanocomposite materials based on bacterial cellulose and MXene // *Polymers.* – 2023. <https://doi.org/10.3390/polym1520406>
 100. Narkkun, T., Kraithong, W., Ruangdit, S., Klaysom, C., Faungnawakij, K., & Itthibenchapong, V. Pebax/modified cellulose nanofiber composite membranes for highly enhanced CO₂/CH₄ separation // *ACS omega.* – 2023. <https://doi.org/10.1021/acsomega.3c04800>
 101. Xing, C., Tian, Y., Yu, Z., Li, Z., Meng, B., & Peng, Z. Cellulose nanofiber-reinforced MXene membranes as stable friction layers and effective electrodes for high-performance triboelectric nanogenerators // *ACS Applied Materials & Interfaces.* – 2022. <https://doi.org/10.1021/acsami.2c10551>
 102. Ahmed, B., Hossain, M. J., Al Parvez, A., Talukder, A., Al-Amin, M., Al Mahmud, M. A., & Islam, T. Recent advancements of MXene/nanocellulose-based hydrogel and aerogel: a review // *Advanced Energy and Sustainability Research.* – 2024. <https://doi.org/10.1002/aesr.202300231>
 103. Zhang, Y., Chen, D., Li, N., Xu, Q., Li, H., He, J., & Lu, J. High-performance and stable two-dimensional MXene-polyethyleneimine composite lamellar membranes for molecular separation // *ACS Applied Materials & Interfaces.* – 2022. <https://doi.org/10.1021/acsami.1c20540>
 104. Xu, T., Song, Q., Liu, K., Liu, H., Pan, J., Liu, W & Zhang, K. Nanocellulose-assisted construction of multifunctional MXene-based aerogels with engineering biomimetic texture for pressure sensor and compressible electrode // *Nano-Micro Letters.* – 2023. <https://doi.org/10.1007/s40820-023-01073-x>

КОМПОЗИТНЫЕ МЕМБРАНЫ НА ОСНОВЕ МХЕНЕ И НАНОЦЕЛЛЮЛОЗЫ:
СВОЙСТВА И ЭФФЕКТИВНОСТЬ В ОЧИСТКЕ ВОДЫ

А. Т. Табынбаева¹, А. Р. Сатаева¹, Н. А. Ахметов², К. Т. Тастамбек^{1,2}, Ж. Т. Тауанов^{1,2*}

¹ «Казахский национальный университет им. Аль-Фараби», Алматы, Казахстан

² «Международный казахско-турецкий университет им. Ходжи Ахмеда Ясави», Туркестан, Казахстан

* E-mail для контактов: tauanov.zhandos@kaznu.kz

В настоящее время нехватка водных ресурсов и снижение их качества являются одной из важнейших экологических и социальных проблем. В результате промышленного производства, сельского хозяйства и бытовой деятельности реки, озера и подземные воды загрязняются тяжелыми металлами, органическими красителями, фармацевтическими остатками, микропластиком и патогенными микроорганизмами. Это приводит к разрушению экосистем, нанесению вреда биоте и увеличению риска для здоровья человека. Традиционные методы очистки воды – отстаивание, хлорирование, адсорбция, использование ионообменных смол – эффективны лишь частично и не способны полностью удалять загрязнители при сложном составе или высокой концентрации. В связи с этим мембранные технологии рассматриваются как перспективное направление, позволяющее эффективно разделять воду на молекулярном уровне, потреблять меньше энергии и обеспечивать экологическую безопасность.

В последние годы особый интерес вызывают композитные мембраны на основе МХене и наноцеллюлозы. МХене – это двухмерные карбиды и нитриды, получаемые из фаз МАХ, обладающие слоистой структурой, высокой электропроводностью, гидрофильностью и функциональными поверхностными группами, что повышает проводимость мембран и эффективность разделения ионов и адсорбции органических загрязнителей. Наноцеллюлоза является биологически разлагаемым наноматериалом, обеспечивающим механическую прочность, стабильность и биосовместимость мембраны, а также повышающим селективность и антифулинговые свойства.

Комбинация МХене и наноцеллюлозы демонстрирует синергетический эффект: наноцеллюлоза предотвращает агрегацию слоев МХене, а прочные межфазные взаимодействия защищают мембрану от дефектов. Это позволяет эффективно удалять соли, тяжелые металлы, органические красители, фармацевтические остатки и микропластик. Кроме того, слоистая структура композита и функциональные группы обеспечивают долгосрочную стабильность и высокую производительность.

В статье подробно рассматриваются свойства МХене и наноцеллюлозы, методы получения композитных мембран, их структурные характеристики и перспективы применения в очистке воды. Исследование демонстрирует потенциал новых поколений мембранных технологий как экологически безопасных, высокоэффективных и стабильных материалов, что имеет важное научное и практическое значение для эффективной очистки воды и долгосрочной стабильности систем.

Ключевые слова: МХене, наноцеллюлоза, селективность, композитная мембрана, тяжелые металлы, очистка воды.

COMPOSITE MEMBRANES BASED ON MXENE AND NANOCELLULOSE:
PROPERTIES AND WATER PURIFICATION EFFICIENCY

A. Tabynbayeva¹, A. Satayeva¹, N. Akhmetov², K. Tastambek^{1,2}, Z. Tauanov^{1,2*}

¹ *Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan*

² *Khoja Akhmet Yassawi International Kazakh-Turkish University, Turkestan, Kazakhstan*

** E-mail for contacts: tauanov.zhandos@kaznu.kz*

The scarcity of water resources and the deterioration of water quality have become critical environmental and social challenges. Rivers, lakes, and groundwater are increasingly contaminated due to industrial, agricultural, and domestic activities, with pollutants including heavy metals, organic dyes, pharmaceutical residues, microplastics, and pathogenic microorganisms. Such contamination disrupts ecosystems, threatens biota, and poses risks to human health. Conventional water treatment methods, such as sedimentation, chlorination, adsorption, and ion-exchange resins, are often insufficient for the complete removal of complex or highly concentrated pollutants. Consequently, membrane-based technologies have emerged as a promising approach, offering molecular-level separation, low energy consumption, and environmentally safe operation.

Recently, composite membranes based on MXene and nanocellulose have attracted significant attention. MXenes, two-dimensional carbides and nitrides derived from MAX phases, possess a layered structure, high electrical conductivity, hydrophilicity, and functional surface groups, enhancing ion separation efficiency and adsorption of organic contaminants. Nanocellulose, a biodegradable nanomaterial, improves the mechanical strength, stability, and biocompatibility of membranes, while also increasing selectivity and antifouling performance.

The combination of MXene and nanocellulose exhibits a synergistic effect: nanocellulose prevents aggregation of MXene layers, and strong interfacial interactions protect membranes from defects. This synergy enables efficient removal of salts, heavy metals, organic dyes, pharmaceutical residues, and microplastics, while the layered structure and functional groups ensure long-term stability and high performance.

This review highlights the properties of MXene and nanocellulose, methods for fabricating composite membranes, their structural characteristics, and potential applications in water purification. The study underscores the potential of next-generation membrane technologies as environmentally safe, highly efficient, and durable solutions for sustainable water treatment, demonstrating both scientific significance and practical relevance.

Keywords: *MXene, nanocellulose, selectivity, heavy metals, composite membrane, water purification.*

<https://doi.org/10.52676/1729-7885-2025-4-79-87>

УДК 621.039.633

ОЦЕНКА ВЫДЕЛЕНИЯ ИОНОВ ТРИТИЯ, ОБРАЗУЮЩИХСЯ В ЯДЕРНОЙ РЕАКЦИИ ${}^6\text{Li}(n, \alpha)\text{T}$ ИЗ ПРИПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ ЛИТИЕВОЙ КЕРАМИКИ В УСЛОВИЯХ РЕАКТОРНОГО ОБЛУЧЕНИЯ

Т. В. Кульсартов^{1,2,3}, Д. С. Сайранбаев¹, М. Т. Айткулов¹, С. Қ. Әскербеков^{1,2},
А. М. Аханов¹, А. Б. Елишенков^{1,2}, Ж. А. Заурбекова^{1,2,3*}, А. А. Шаймерденов¹

¹ РГП «Институт ядерной физики» Агентства РК по атомной энергии, Алматы, Казахстан

² «Институт экспериментальной и теоретической физики» Казахского
национального университета им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан

³ филиал «Институт атомной энергии» РГП НЯЦ РК, Курчатов, Казахстан

* E-mail для контактов: zzha@physics.kz

Представлены аналитические результаты по оценке стационарного потока ионов трития, выделяющихся из керамики на основе лития Li_2TiO_3 различного обогащения в условиях реакторного облучения на реакторе ВВР-К. Нейтронно-транспортные расчёты выполнены в MCNP6 с использованием библиотеки ENDF/B-VII.1 и сопоставлены с in-situ газовыделением, зарегистрированным при температуре керамики 650 °С и потоке тепловых нейтронов $5 \cdot 10^{13}$ н/(см² с). Разработанная расчетная модель не содержит подгоночных коэффициентов и учитывает длину пробега ионов, эффект самоэкранирования в керамике ($\delta = 0,32$) и потери на рекомбинацию. Полученные значения потока T^+ из керамики различного изотопного состава составляют $3,07 \cdot 10^{-13}$ до $1,96 \cdot 10^{-12}$ моль/с. Максимальное снижение потока за счёт самоэкранирования в керамике не превышает 32%. Расхождение между расчётом и экспериментом по компоненте НТ не превышает 15%, что подтверждает адекватность подхода. Результаты имеют практическую значимость при оценке баланса трития в бланкетах термоядерных реакторов (ТЯР) и позволяют оптимизировать состав и размер керамических пэбблов с учётом безактивационного газовыделения трития.

Ключевые слова: литиевая керамика, нейтронное облучение, тритий, гелий, MCNP6.

ВВЕДЕНИЕ

Основные функции бридерного бланкета в термоядерном реакторе заключаются в получении достаточного количества трития для обеспечения потребности в топливе в течение срока службы реактора, а также, наряду с этим, в преобразовании кинетической энергии нейтронов дейтерий-трیتیевой (DT) реакции синтеза в тепло. Твердотельные бридерные бланкеты, которые будут испытаны в международном термоядерном экспериментальном реакторе ITER [1–6], широко рассматриваются как перспективная концепция для будущих установок, включая демонстрационный реактор DEMO [7–9]. При облучении тритий образуется в кристаллической решетке литиевых керамик, таких как Li_2TiO_3 и Li_4SiO_4 , в результате реакций ${}^6\text{Li}(n, \alpha)\text{T}$ и ${}^7\text{Li}(n, p\alpha)\text{T}$, и может как диффундировать в газовую фазу, так и задерживаться в решетке и приповерхностной зоне материала. Поскольку литиевая керамика является ключевым элементом бланкета, понимание механизмов извлечения трития, особенно его ионной компоненты, становится критически важным.

Ряд работ [10–12] показал, что скорость выделения трития из твердых материалов в основном определяется диффузией [13, 14]. Существенные различия в коэффициентах диффузии объясняются как условиями эксперимента, так и состоянием образцов [15, 16]. Основную роль при этом играют захват трития радиационными ловушками и изотопный обмен на поверхности образца.

Из-за высокой энергии образующихся атомов трития и гелия (2–3 МэВ) в материалах бланкета возникают радиационные повреждения, действующие как ловушки для трития. В [17] показано, что диффузионная подвижность трития в Li_4SiO_4 снижается с ростом нейтронного флюенса. В [18] предполагается, что в керамике Li_2TiO_3 основными центрами захвата являются кислородные вакансии и свободные атомы кислорода. Эти радиационно-индуцированные ловушки усложняют обработку и анализ полученных экспериментальных данных.

Чаще всего тритийвоспроизводящие материалы исследуются в пост-реакторных экспериментах после воздействия нейтронного облучения, однако такие методы затрудняют точную интерпретацию параметров выделения трития. Более информативными являются in-situ измерения, поскольку условия облучения напрямую влияют на поведение трития, миграция которого включает диффузию, захват в радиационных ловушках, взаимодействие с атомами решетки и десорбцию с поверхности.

Стоит отметить, что в Республике Казахстан на протяжении последних десятилетий проводятся исследования в различных областях ядерной и термоядерной энергетики, включая вопросы радиоэкологии, материаловедения и реакторных испытаний [19–29]. Часть реакторных экспериментов посвящена in-situ исследованиям различных литиевых керамик, таких как Li_2TiO_3 с обогащением по ${}^6\text{Li}$ 96% и двухфазной керамики $\text{Li}_2\text{TiO}_3/\text{Li}_4\text{SiO}_4$ [30–34]. Одним из ма-

ОЦЕНКА ВЫДЕЛЕНИЯ ИОНОВ ТРИТИЯ, ОБРАЗУЮЩИХСЯ В ЯДЕРНОЙ РЕАКЦИИ $6\text{Li}(n, \alpha)\text{T}$ ИЗ ПРИПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ ЛИТИЕВОЙ КЕРАМИКИ В УСЛОВИЯХ РЕАКТОРНОГО ОБЛУЧЕНИЯ

лоизученных процессов здесь является выделение трития безактивационно – непосредственно из приповерхностной области литиевой керамики. В представляемой работе проведены расчетные оценки количества трития, выделяющегося подобным образом, а именно – из приповерхностной области литиевой керамики. Целью работы является построение аналитической модели и расчёт потоков ионов трития, выделяющихся безактивационным образом из приповерхностной области литиевых керамик в условиях реакторного облучения.

ОПИСАНИЕ ТИПОВЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ ПО ИССЛЕДОВАНИЮ ВЫДЕЛЕНИЯ ТРИТИЯ ИЗ ЛИТИЕВОЙ КЕРАМИКИ В УСЛОВИЯХ ОБЛУЧЕНИЯ НА РЕАКТОРЕ ВВР-К

Перед началом описания расчетной методики и результатов оценки количества трития, выделяющегося безактивационным образом из приповерхностной области литиевых керамик в условиях облучения, кратко опишем типовые реакторные эксперименты по in-situ исследованиям выделения трития.

Эксперименты проводились по одной схеме на установке CIRRA, расположенной на реакторе ВВР-К (рисунок 1). Исследуемые образцы литиевой керамики представляли собой шарики (диаметром ~1 мм), которые размещались внутри загрузочной капсулы. Загрузочная капсула помещалась в откачиваемой ампуле, соединенной с экспериментальной

установкой (рисунок 2). Образцы были расположены в реакторном ампульном устройстве на уровне центра активной зоны реактора.

Эксперимент по газовыделению заключался в следующем: образцы литиевой керамики облучались в условиях непрерывной откачки, при этом масс-спектрометрическим способом регистрировалось выделение тритийсодержащих молекул (НТ, T_2 , НТО и T_2O). Средняя температура образцов при облучении составляла ~650 °С, время облучения составляло ~21 сутки при потоке тепловых нейтронов $\sim 5 \cdot 10^{13}$ н/(см²·с).

Результаты экспериментов показали [32]:

1) основное количество трития выделяется в виде молекулы НТ, при этом уровень выделения НТ на порядок превышает выделение молекулы T_2 (рисунок 3);

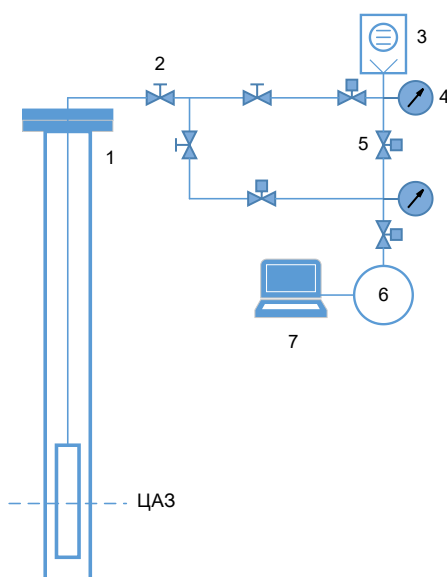
2) выделение трития в виде молекул тритиевой воды не зафиксировано;

3) при увеличении температуры керамики в первый момент происходит существенное увеличение выделения молекулы НТ (и падение уровня выделения молекулы T_2), после чего наблюдается снижение потока выделения молекулы НТ к среднему уровню;

4) измеренный равновесный уровень выделения трития соответствовал скоростям наработки трития в керамике в диапазоне от $5,05 \cdot 10^{-11}$ до $3,19 \cdot 10^{-10}$ моль/(с·см³) (таблица 1).

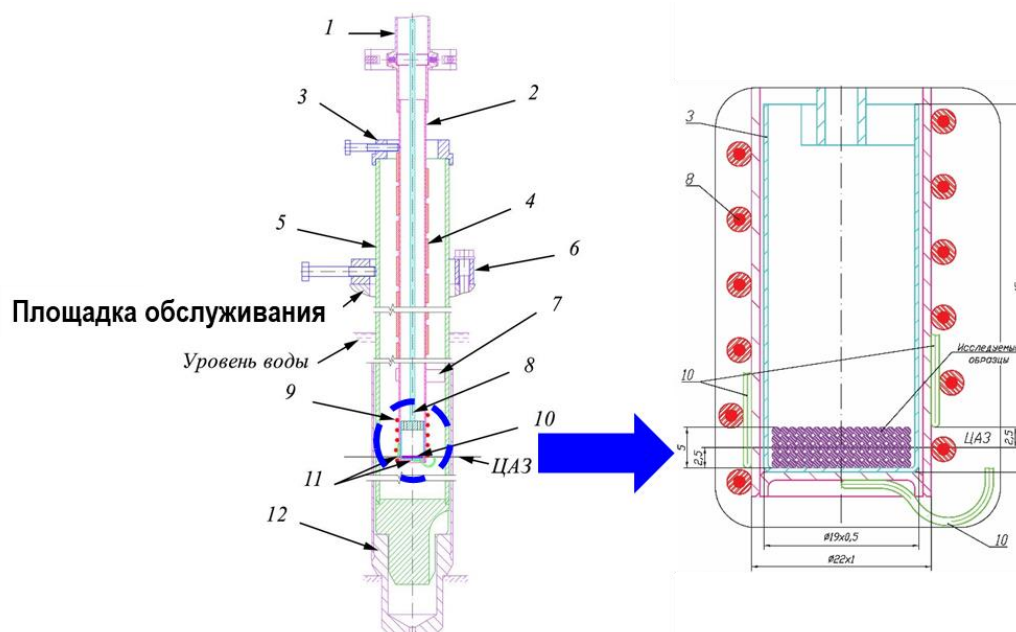
Таблица 1. Экспериментально определенные скорости наработки трития в керамике

Литиевая керамика	Li_2TiO_3 (естеств.)	Li_2TiO_3 (96% обог.)
Скорость ядерной реакции $\text{Li}^6(n, \alpha)\text{T}$, моль/(с·см ³)	$5,05 \cdot 10^{-11}$	$3,19 \cdot 10^{-10}$



1 – экспериментальное устройство; 2 – вентиль; 3 – откачной пост; 4 – датчик давления; 5 – электроклапан; 6 – масс-спектрометр; 7 – компьютер

Рисунок 1. Схема комплекса CIRRA



1 – соединение с газовакуумным трактом; 2 – ампульное устройство; 3 – верхний центрирующий фланец; 4 – ленточный нагреватель; 5 – загрузочный канал; 6 – держатель; 7 – дистанционаторы; 8 – загрузочная капсула; 9 – термопарный нагреватель; 10 – образцы; 11 – термопары; 12 – вытеснитель [32]

Рисунок 2. Схема облучательного устройства

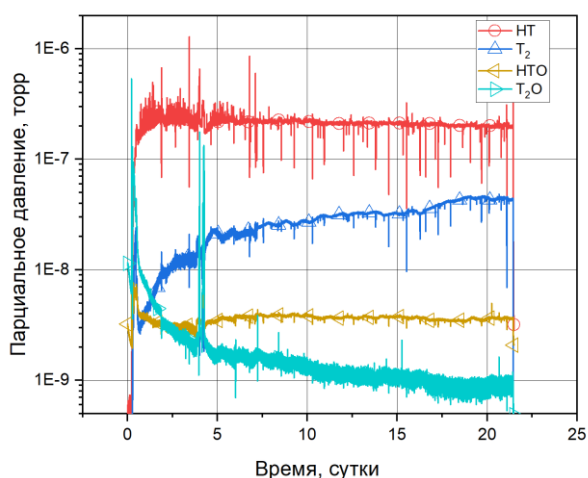
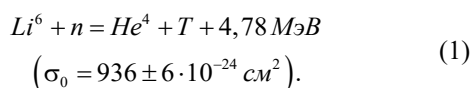


Рисунок 3. Диаграмма изменения парциальных давлений газов в экспериментальной камере с образцом литиевой керамики во время облучения на реакторе

РАСЧЕТНАЯ МЕТОДИКА ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПОТОКОВ ВЫДЕЛЯЮЩИХСЯ ИОНОВ ТРИТИЯ, ОБРАЗОВАВШИХСЯ В РЕЗУЛЬТАТЕ ЯДЕРНОЙ РЕАКЦИИ ${}^6\text{Li}(n, \alpha)\text{T}$ ИЗ ПРИПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ ЛИТИЕВОЙ КЕРАМИКИ В УСЛОВИЯХ ОБЛУЧЕНИЯ

Как известно, под действием нейтронного облучения в литии будет накапливаться радиоактивный изотоп водорода – тритий по реакции:



Фокус на реакции с ${}^6\text{Li}$ обоснован несколькими факторами:

1. Значительно большее сечение захвата нейтронов. Для тепловых нейтронов сечение реакции ${}^6\text{Li}(n, \alpha)\text{H}$ составляет около 940 барн, тогда как соответствующее сечение для ${}^7\text{Li}$ находится в миллибарновом диапазоне и потому пренебрежимо при тепловых энергиях. Таким образом, вклад ${}^7\text{Li}$ в генерацию трития в преимущественно тепловом спектре практически отсутствует.

2. Высокий порог реакции на ${}^7\text{Li}$. Реакция ${}^7\text{Li} + n \rightarrow {}^3\text{H} + \alpha + n' - 2,5 \text{ МэВ}$ имеет порог около ~2,8 МэВ. В бридерных blankets, рассчитанных на тепловые или эпитепловые нейтроны, этот канал фактически закрыт, что делает его вклад в генерацию трития пренебрежимо малым.

3. Высокая степень обогащения по ${}^6\text{Li}$. В образцах Li_2TiO_3 доля ${}^6\text{Li}$ составляет ~96 ат. %, по сравнению с 7,6% в природном литии. При таком обогащении практически все захваты нейтронов происходят на ${}^6\text{Li}$, тогда как ${}^7\text{Li}$ остаётся практически инертным в отношении образования трития.

4. Упрощение моделирования. Исключение незначительных каналов с ${}^7\text{Li}$ сводит задачу к одной доминирующей реакции образования трития. Это позволяет более точно и эффективно определять параметры диффузии трития в Li_2TiO_3 без необходимости учитывать вторичные кинетические пути.

Для конкретного в данной статье облучения будем полагать, что скорость реакции (1) известна и равна R (моль/(м³·с)). Образующиеся ионы трития и гелия с энергиями E_{T} и E_{He} (МэВ) будут взаимодействовать

ОЦЕНКА ВЫДЕЛЕНИЯ ИОНОВ ТРИТИЯ, ОБРАЗУЮЩИХСЯ В ЯДЕРНОЙ РЕАКЦИИ $6\text{Li}(n, \alpha)\text{T}$ ИЗ ПРИПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ ЛИТИЕВОЙ КЕРАМИКИ В УСЛОВИЯХ РЕАКТОРНОГО ОБЛУЧЕНИЯ

воват с атомами материала посредством взаимодействия с электронами: образовавшаяся в веществе частица с определённой энергией, пролетая сквозь него, «расталкивает» атомные электроны своим кулоновским полем. За счет чего частица постепенно теряет энергию, а атомы либо ионизируются, либо возбуждаются. Потратив свою энергию, частица останавливается. Пролетающая частица при столкновении с отдельным электроном мало отклоняется от своего пути из-за большой массы (по сравнению с массой электрона), причем эти малые отклонения почти целиком компенсируют друг друга при огромном числе хаотически ориентированных столкновений. Поэтому траектория частицы в веществе практически прямолинейна.

Как известно, длину пробега ионов λ (м) в исследуемом материале можно оценить по формуле Бете-Блоха для ионизационных потерь [35]:

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi n Z^2 e^4}{m v^2} \cdot \left(\ln \frac{2mv^2}{I(1-\beta^2)} - \beta^2 \right), \quad (2)$$

где m – масса электрона; c – скорость света; v – скорость частицы; $\beta = v/c$; Z – заряд частицы в единицах заряда позитрона; n – плотность электронов в веществе; I – средний ионизационный потенциал атомов вещества среды, через которую проходит частица.

Для проведения подобных расчетов обычно используют программу LISE++, которая предназначена для прогнозирования интенсивности и чистоты радиоактивных ионных пучков, создаваемых сепараторами в полете. LISE++ также облегчает настройку экспериментов, в которых его результаты можно быстро сравнить со справочными данными [36]). Для каждого конкретного расчета используют модуль калькулятора программы, где вводится замедляемый изотоп, его энергия, а также параметры мишени – ее плотность и стехиометрический состав атомов.

Рассмотрим двухмерную геометрию выделения атомов трития и гелия из приповерхностного слоя плоской поверхности литиевой керамики (рисунок 4). Пусть в точке А на расстоянии x от поверхности происходит R реакций (1). Образующиеся частицы изотропно испускаются в точке А. Тогда количество ионов, вышедших из материала, будет определяться равнобедренным треугольником со стороной λ , причем в сегменте угла 2α все ионы покинут материал. Количество ионов будет равно:

$$F = R \cdot \frac{\arccos(\alpha)}{\pi} = R \cdot \arccos(x/\lambda) / \pi. \quad (3)$$

Интегрируя от 0 до λ по x несложно получить выражения для N (моль/с) – скорости выделения ионов из приповерхностного слоя (площадью S (м²)).

$$N = \frac{R \cdot S}{\pi} \int_0^\lambda (\arccos(x/\lambda)) dx = R \cdot S \cdot \lambda / \pi. \quad (4)$$

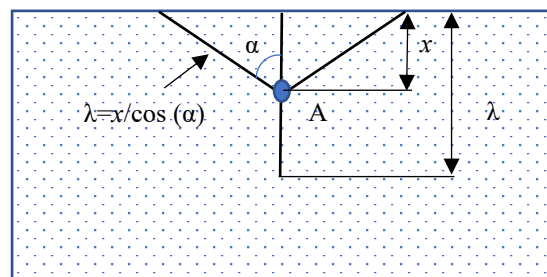


Рисунок 4. Двухмерная геометрия выделения атомов трития и гелия из приповерхностного слоя плоской поверхности литиевой керамики

Учитывая, что длина пробега составляет менее 25 мкм для исследуемых керамик (при диаметре пэббла керамики D равном 1 мм) легко показать, что формула (4) для выделения ионов из тонкого слоя, полностью релевантна для шарообразных пэбблов (площадь пэббла $S_p = 4\pi \cdot D^2/4$). Учет шарообразной формы пэббла будет значим для случая, когда $2\lambda/D > 0,1$, в то время как для рассматриваемых случаев этот параметр менее 0,05.

В случае, когда оценивается количество ионов, вылетающих из внешнего слоя засыпки пэбблов (количеством N_0) необходимо учесть экранирование ионов другими пэбблами. Выражение (4) для количества ионов, которые вылетают в направлении свободной поверхности и не экранируются, примет вид:

$$N = 2N_0 \cdot R \cdot r^2 \cdot \lambda (1 - \delta), \quad (5)$$

где r – радиус пэббла (м); δ – коэффициент экранировки или доля ионов поглощенных соседними пэбблами, отнесенная к общему количеству ионов, вылетевших из пэббла в направлении свободной поверхности.

Оценим максимальное значение коэффициента экранировки для пэбблов одинакового радиуса расположенных на плоскости. На рисунке 4 приведено двухмерное сечение расположенных рядом пэбблов одного радиуса (причем это сечение подразумевает максимальную экранировку пэбблов).

Отметим, что, так как свободный пробег ионов в материале существенно меньше, чем его радиус, то справедливы следующие положения: а) можно считать, что излучает непосредственно поверхность сферы (причем в каждой локальной точке поверхности справедливо выражение (2) для скорости выделяющихся ионов); б) поверхности пэбблов ограничивают распространение ионов, вылетевших из других пэбблов.

Рассмотрим выделение ионов из точки В, в сегменте угла β (образованного касательной в точке В для левой окружности и касательной проведенной через точку В для правой окружности). Все ионы, вылетающие в область свободной поверхности (вверх), не будут экранироваться пэбблами (рисунок 5). Проведем интегрирование по правой четверти левой окружности, для получения относительного количества

ОЦЕНКА ВЫДЕЛЕНИЯ ИОНОВ ТРИТИЯ, ОБРАЗУЮЩИХСЯ В ЯДЕРНОЙ РЕАКЦИИ $6\text{Li}(n, \alpha)\text{T}$ ИЗ ПРИПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ ЛИТИЕВОЙ КЕРАМИКИ В УСЛОВИЯХ РЕАКТОРНОГО ОБЛУЧЕНИЯ

ионов, вылетающих с поверхности пэббла, без экранировки:

$$(1 - \delta) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} \left(\frac{\beta(\alpha)}{\pi} \right) d\alpha \quad (6)$$

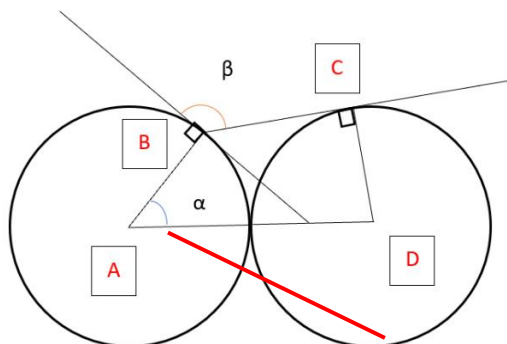


Рисунок 5. Двухмерное сечение расположенных рядом пэбблов одного радиуса

Для оценки интеграла нужно получить выражение, связывающее углы α и β . Его можно получить, используя инструменты аналитической геометрии:

$$\beta = \alpha + \arcsin\left(\frac{\sin \alpha}{\sqrt{5 - 2 \cos \alpha}}\right) + \arccos\left(\frac{1}{\sqrt{5 - 2 \cos \alpha}}\right) \quad (7)$$

Полученный интеграл был рассчитан с помощью модуля расчета WolframAlpha [37]. Оцененный максимальный коэффициент самоэкранировки составил $\delta = 0,32$.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ ПОТОКОВ ТРИТИЯ ВЫДЕЛЯЮЩЕГОСЯ БЕЗАКТИВАЦИОННЫМ ОБРАЗОМ ИЗ ПРИПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ ЛИТИЕВЫХ КЕРАМИК

Первоначально на основе нейтронно-физических расчетов были получены плотности потока нейтронов в приповерхностном слое литиевых керамик, значения которых указаны в сводной таблице 1. Нейтронно-физические расчеты были проведены в программной среде MCNP [38], где были воспроизведены в деталях геометрия и материалы всех элементов активной зоны реактора ВВР-К. Ядерный состав топлива задавался индивидуально для каждой тепловыделяющей сборки реактора (ТВС), сначала – на основе заводских паспортов ТВС, а потом учитывалось уменьшение количества ядер урана и количество радионуклидов, образующихся в результате реакции деления урана. Также учитывалась реальная длительность работы каждого цикла реактора. Цикл за циклом прослеживалась история каждой ТВС и каждого блока бериллия. Для каждого цикла рассчитывались выгорание урана в каждой ТВС и наработка продуктов деления (около 300 нуклидов), а также активность каждой ТВС. Все это позволило создать точную модель активной зоны реактора ВВР-К.

MCNP используется для моделирования переноса нейтронов “N”, фотонов “P”, электронов “E”, а также в комбинированных задачах типа “N, P”, в средах, описываемых полномасштабной 3-D геометрией, задаваемой как пересечения, объединения и совокупности областей, ограниченных поверхностями до 4-ого порядка. Для проверки правильности задаваемой геометрии используется стандартная система PLOT, позволяющая отображать сечения геометрической структуры рассматриваемой системы в различных плоскостях. Код MCNP позволяет проводить расчеты различных функционалов, представляющих свертку нейтронного потока с ядерно-физическими данными. Все функционалы – это функции времени и энергии, нормированные на один нейтрон генерации. Функционалы рассчитываются в зонах регистрации, которые представляются в виде различных областей (сегмент ячейки или несколько ячеек, поверхность, участок поверхности, несколько поверхностей и др.). В расчетах использовалась библиотека ядерных констант ENDF/B-VII.1 [39].

Плотность потока нейтронов Φ в зоне расположения образцов определялась с помощью функционала tally F4 по формуле:

$$\Phi = \frac{P \cdot \nu}{1,6022 \cdot 10^{-13} \cdot w_f} \cdot \frac{1}{k_{eff}} \cdot \Phi_{F4}, \quad \frac{\text{нейтрон}}{\text{см}^2 \cdot \text{с}} \quad (8)$$

где P – тепловая мощность реактора, Вт; ν – число вторичных нейтронов на один акт деления; k_{eff} – эффективный коэффициент размножения нейтронов; Φ_{F4} – значение функционала, см^{-2} .

Детектор представлял собой сферу с радиусом 1 см. Статистическая погрешность расчетов не превышала 5%. Энергетическое распределение нейтронов в облучательной позиции показано на рисунке 6.

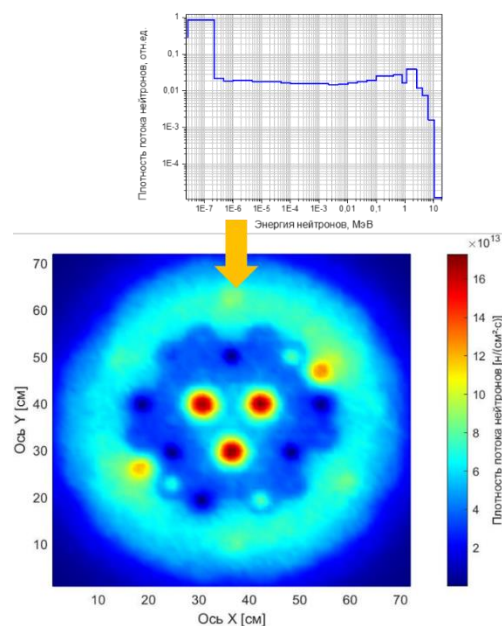


Рисунок 6. Энергетическое распределение нейтронов в облучательной позиции

ОЦЕНКА ВЫДЕЛЕНИЯ ИОНОВ ТРИТИЯ, ОБРАЗУЮЩИХСЯ В ЯДЕРНОЙ РЕАКЦИИ ${}^6\text{Li}(n, \alpha)\text{T}$ ИЗ ПРИПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ ЛИТИЕВОЙ КЕРАМИКИ В УСЛОВИЯХ РЕАКТОРНОГО ОБЛУЧЕНИЯ

Далее, воспользовавшись выражением (4), был оценен диапазон потоков выделяющихся ионов трития из засыпки пэбблов различных литиевых керамик в направлении свободной поверхности (таблица 2) при проведении экспериментов на реакторе ВВР-К.

Таблица 2. Расчетные параметры и результаты расчетов потоков выделяющихся ионов трития из засыпки пэбблов литиевой керамики в направлении свободной поверхности

Литиевая керамика	Li_2TiO_3 (естест.)	Li_2TiO_3 (96% обог.)
Высота засыпки, мм	0,4724	0,4726
Радиус засыпки, мм	9,5	9,5
Масса, г	0,2009	0,2010
Плотность пэббла, г/см ³	3,077	3,077
Плотность засыпки, г/см ³	1,50	1,50
Скорость ядерной реакции ${}^6\text{Li}(n, \alpha)\text{T}$, реакций/(м ³ ·с)	$3,00 \cdot 10^{13}$	$1,92 \cdot 10^{14}$
λ , мкм	19,07	19,0
Поток ионов трития из засыпки пэбблов литиевой керамики, моль/с	$3,07 \cdot 10^{-13}$	$1,96 \cdot 10^{-12}$

Получен диапазон стационарных потоков ионов трития из приповерхностного слоя литиевых керамик Li_2TiO_3 различного обогащения в экспериментах на реакторе ВВР-К, который составил от $3,07 \cdot 10^{-13}$ до $1,96 \cdot 10^{-12}$ моль/с. Рост потока ионов трития с увеличением обогащения в керамике подтверждает доминирующую роль изотопа ${}^6\text{Li}$, но отклонение от линейности указывает, что химический состав матрицы влияет на тормозную способность среды. Фактически это даёт инженерный «коридор» для подбора состава керамики, позволяющий выбрать оптимальный вариант между высоким выходом трития и допустимым тепловыделением в керамике.

Выводы

Разработана самодостаточная аналитическая модель выделения ионов трития из литиевой керамики, которая учитывает генерацию трития в реакциях (n, α) с ядрами ${}^6\text{Li}$, геометрию пэббла, длину пробега ионов и вероятности их выхода на поверхность образца. Отсутствие подгоночных коэффициентов свидетельствует о том, что модель обладает высокой степенью универсальности и может быть применена к различным типам керамик и условий облучения, не требуя эмпирической калибровки.

Для репрезентативной засыпки пэбблов (толщина слоя ~9,5 мм) получен диапазон стационарных потоков ионов трития из приповерхностного слоя различных литиевых керамик на основе метатитаната лития в экспериментах на реакторе ВВР-К, который составил от $3,07 \cdot 10^{-13}$ до $1,96 \cdot 10^{-12}$ моль/с.

В работе оценен параметр самоэкранирования $\delta = 0,32$ который показывает, что самоэкранирование в керамике оказывает заметное, но не критическое влияние на поток выделяющихся ионов трития с поверхности: даже при «плотной» засыпке пэбблов ма-

ксимальные потери ионов трития не превышают одной трети.

Полученные расчетные оценки будут использоваться для оценки баланса трития в системе для проведения реакторных экспериментов.

Финансирование

Данное исследование было профинансировано Комитетом науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (No. BR21881930 «Реакторные исследования, направленные на обеспечение безопасной и эффективной эксплуатации перспективных ядерных и термоядерных энергетических установок»).

ЛИТЕРАТУРА / REFERENCES

1. Cismonti F., Kecskés S., Ilic M., Légrádi G., Kiss B., Bitz O., Dolensky B., Neuberger H., Boccaccini L.V., Ihli T. Design update, thermal and fluid dynamic analyses of the EU-HCPB TBM in vertical arrangement // Fusion Engineering and Design. – 2009. – Т. 84. – Р. 607–612.
2. Hernández F., Cismonti F., Kiss B. Thermo-mechanical analyses and assessment with respect to the design codes and standards of the HCPB-TBM breeder unit // Fusion Engineering and Design. – 2012. – Т. 87. – Р. 1111–1117.
3. Bhattacharyay R. Status of indian LLCB TBM program and R&D activities // Fusion Engineering and Design. – 2014. – Т. 89. – Р. 1107–1112.
4. Cao Q., Zhao F., Zhao Z., Wu X., Li Z., Wang X., Feng K. Neutronic calculation analysis for CN HCCB TBM-Set // Plasma Science and Technology. – 2015. – Т. 17. – Р. 607–611.
5. Enoda M., Tanigawa H., Hirose T., Nakajima M., Sato S., Ochiai K., Konno C., Kawamura Y., Hayashi T., Yamanishi T., Hoshino T., Nakamichi M., Tanigawa H., Nishi H., Suzuki S., Ezato K., Seki Y., Yokoyama K. R&D status on water cooled ceramic breeder blanket technology // Fusion Engineering and Design. – 2014. – Т. 89. – Р. 1131–1136.
6. Lee D.W., Jin H.G., Lee E.H., Yoon J.S., Kim S.K., Lee C.W., Ahn M.-Y., Cho S. Integrated design and performance analysis of the KO HCCR TBM for ITER // Fusion Engineering and Design. – 2015. – Т. 98–99. – Р. 1821–1824.
7. Someya Y., Tobita K., Utoh H., Tokunaga S., Hoshino K., Asakura N., Nakamura M., Sakamoto Y. Design study of blanket structure based on a water-cooled solid breeder for DEMO // Fusion Engineering and Design. – 2015. – Т. 98–99. – Р. 1872–1875.
8. Federici G., Kemp R., Ward D., Bachmann C., Franke T., Gonzalez S., Lowry C., Gadomska M., Harman J., Meszaros B., Morlock C., Romanelli F., Wenninger R. Overview of EU DEMO design and R&D activities // Fusion Engineering and Design. – 2014. – Т. 89. – Р. 882–889.
9. Boccaccini L., Giancarli L., Janeschitz G., Hermsmeyer S., Poitevin Y., Cardella A., Diegele E. Materials and design of the European DEMO blankets // Journal of Nuclear Materials. – 2004. – Т. 329–333. – Р. 148–155.
10. Moriyama H., Tanaka S., Noda K. Irradiation effects in ceramic breeder materials // Journal of Nuclear Materials. – 1998. – Т. 258–263. – Р. 587–594.
11. Tanifuji T., Yamaki D., Jitsukawa S. Tritium release from neutron-irradiated Li_2O sintered pellets: fluence dependen-

- ce // *Journal of Nuclear Materials*. – 2002. – Т. 307–311. – P. 1456–1460.
12. Johnson C.E., Kopasz J.P., Tam S.W. Advanced understanding of the tritium recovery process from the ceramic breeder blanket // *Journal of Nuclear Materials*. – 1997. – Т. 248. – P. 91–100.
 13. Billone M.C. Thermal and tritium transport in Li_2O and Li_2ZrO_3 // *Journal of Nuclear Materials*. – 1996. – Т. 233–237. – P. 1462–1466.
 14. Okuno K., Kudo H. Tritium diffusivity in lithium-based ceramic breeders irradiated with neutrons // *Fusion Engineering and Design*. – 1989. – Т. 8. – P. 355–358.
 15. Kinjo T., Nishikawa M., Enoda M., Fukada S. Tritium diffusivity in crystal grain of Li_2TiO_3 and tritium release behavior under several purge gas conditions // *Fusion Engineering and Design*. – 2008. – Т. 83. – P. 580–587.
 16. Tanifuji T., Yamaki D., Nasu S., Noda K. Tritium release behavior from neutron-irradiated Li_2TiO_3 single crystal // *Journal of Nuclear Materials*. – 1998. – Т. 258–263. – P. 543–548.
 17. Moritani K., Magari T., Moriyama H. Tritium release kinetics of lithium silicates with irradiation defects // *Fusion Engineering and Design*. – 1998. – Т. 39. – P. 675–679.
 18. Inagaki Y., Liu H., Ishikawa H., Suzuki S., Yoshikawa A. и др. Role of lithium on chemical states and retention behavior of tritium in Li_2TiO_3 // *Fusion Science and Technology*. – 2009. – Т. 56. – P. 821–825.
 19. Ларионова Н.В., Кривицкий П.Е., Топорова А.В., Поливкина Е.Н., Айдарханов А.О. Накопление радионуклидов ^{137}Cs и ^{90}Sr растениями на участке радиоактивных выпадений Семипалатинского испытательного полигона // *Вестник НЯЦ РК*. – 2022. – № 3. – С. 26–30. [Larionova N.V., Krivitskiy P.Ye., Toporova A.V., Polivkina Ye.N., Aidarkhanov A.O. Accumulation of Cs-137 and Sr-90 by plants in the fallout area at the Semipalatinsk Test Site // *NNC RK Bulletin*. – 2022. Issue 3. – P. 26–30. (In Russ.)] <https://doi.org/10.52676/1729-7885-2022-3-26-30>
 20. Krivitskiy, P.Ye. Peculiarities of radioactive soil contamination in places of underground nuclear tests in the Semipalatinsk test site / P.Ye. Krivitskiy, N.V. Larionova, V.N. Monayenko, S.B. Subbotin, A.A. Chernov, A.V. Panitskiy // *Journal of Environmental Radioactivity*. – 2022. – Т. 253–254. – 106991.
 21. Kunduzbayeva, A.Ye. Speciation of ^{137}Cs , ^{90}Sr , ^{241}Am , and $^{239+240}\text{Pu}$ artificial radionuclides in soils at the Semipalatinsk test site / A.Ye. Kunduzbayeva, S.N. Lukashenko, A.M. Kabdyrakova, N.V. Larionova, R.Yu. Magasheva, G.A. Bakirova // *Journal of Environmental Radioactivity*. – 2022. – Т. 249. – 106867.
 22. Turchenko, D.V. Identification of tritium-contaminated areas using a tritium survey on the snow cover, the case of Semipalatinsk test site / D.V. Turchenko, L.V. Timonova, P. Ye Krivitskiy, A.K. Aidarkhanova, M.T. Abisheva, A.O. Aidarkhanov // *Journal of Environmental Radioactivity*. – 2024. – Т. 278. – 107487.
 23. Larionova, Natalya Artificial radionuclides in the plant cover around nuclear fuel cycle facilities / Natalya Larionova, Anna Toporova, Pavel Krivitskiy, Vasilii Polevik, Natalya Lechshenko, Valeriy Monayenko, Mariya Abisheva, Viktor Baklanov, Assan Aidarkhanov, Vladimir Vityuk // *PLoS ONE*. – 2024. – Т. 19, No. 7. – e0306531.
 24. Aktayev, Medet Characterization of geological and lithological features in the area proximal to tritium-contaminated groundwater at the Semipalatinsk test site / Medet Aktayev, Sergey Subbotin, Assan Aidarkhanov, Almira Aidarkhanova, Lyubov Timonova, Natalya Larionova // *PLoS ONE*. – 2024. – Т. 19, No. 3. – e0300971.
 25. Ponkratov, Y., Samarkhanov, K., Koyanbayev, Y., Baklanova, Y., Gordienko, Y., Tulubayev, Y., ... Saparbek, E. (2024). Technique of Reactor Experiments of Tin-Lithium Alloy Interaction with Hydrogen Isotopes Under Neutron Irradiation Conditions // *Fusion Science and Technology*. – 2024. – 101825.
 26. Irina Tazhibayeva, Yuriy Ponkratov, Igor Lyublinsky, Yuriy Gordienko, Alexey Vertkov, Yevgeniy Tulubayev, Kuanysh Samarkhanov, Vadim Bochkov, Yernat Kozhakhmetov, Nurkhat Orazgaliyev. Study of liquid tin-lithium alloy interaction with structural materials of fusion reactor at high temperatures // *Nuclear Materials and Energy*. – 2022. – Т. 30. – 101152.
 27. I.E. Lyublinski, A.V. Vertkov, M.Yu. Zharkov, A.V. Berlov, M.A. Ladyko, S.V. Mirnov, V.B. Lazarev, V.A. Vershkov, G.E. Notkin, A.V. Zakharenkov, I.L. Tazhibayeva, Yu.V. Ponkratov, Yu.N. Gordienko Stationary Operated Lithium In-Vessel Elements of a Tokamak // *Physics of Atomic Nuclei*. – 2021. – Т. 84, No. 7. – P. 1–7.
 28. Tazhibayeva, I., Skakov, M., Baklanov, V., Koyanbayev, E., Miniyazov, A., Kulsartov, T., ... Nesterov, E. (2017). Study of properties of tungsten irradiated in hydrogen atmosphere // *Nuclear Fusion*. – 2017. – Т. 57, No 12. – 126062.
 29. Yu. Ponkratov, E. Batyrbekov, M. Khasenov, K. Samarkhanov, Ye. Chikhray Application of high energy tritium ions and α -particles formed in $^6\text{Li}(n, \alpha)\text{T}$ nuclear reaction to excite the luminescence of inert gas mixtures // *Fusion Science and Technology*. – 2021. – Т. 77, No 4, P. 327 – 332.
 30. Blynskiy, P.; Chikhray, Ye; Kulsartov, T.; Gabdullin, M.; Zaurbekova, Zh; Kizane, G.; Kenzhin, Ye; Tolenova, A.; Nesterov, E.; Shaimerdenov, A. Experiments on tritium generation and yield from lithium ceramics during neutron irradiation // *International journal of hydrogen energy*. – 2021. – Т. 46 (13). – P. 9186–9192.
 31. Kulsartov, Timur; Shaimerdenov, Asset; Zaurbekova, Zhanna; Kenzhina, Inesh; Chikhray, Yevgen; Kizane, Gunta; Blynskiy, Petr; Akhanov, Assyl; Ponkratov, Yuriy. Features of the in-situ experiments on studying of tritium release from lithium ceramic Li_2TiO_3 using vacuum extraction method // *Fusion engineering and design*. – 2021. – Т. 172. – 11270.
 32. Kulsartov, T.; Kenzhina, I; Chikhray, Ye; Zaurbekova, Zh; Kenzhin, Ye; Aitkulov, M.; Gizatullin, Sh; Dyussambayev, D. Determination of the activation energy of tritium diffusion in ceramic breeders by reactor power variation // *Fusion engineering and design*. – 2021. – Т. 172. – 112783.
 33. Kulsartov, T.; Kenzhina, I; Tolenova, A.; Kenzhin, Ye; Shaimerdenov, A.; Nesterov, Ye; Gizatullin, Sh; Chikhray, Ye; Gluchshenko, A. Modeling of hydrogen isotopes release from lithium ceramics Li_2TiO_3 during in-situ experiments using vacuum extraction method // *Fusion engineering and design*. – 2021. – Т. 170. – 112705.
 34. Kulsartov, T; Zaurbekova, Z; Knitter, R; Kenzhina, I; Chikhray, Y; Shaimerdenov, A; Askerbekov, S; Kizane, G; Yelishenkov, A; Zholdybayev, T. Comparative analysis
-

- of gas release from biphasic lithium ceramics pebble beds of various pebbles sizes and content under neutron irradiation conditions // Nuclear materials and energy. – 2024. – Т. 38. – 101583.
35. Bethe H., Ashkin J. Experimental Nuclear Physics / Ed. E. Segré. – New York: J. Wiley, 1953.
36. LISE++ Rare Isotope Beam Production [Электронный ресурс]. – 2025. – Режим доступа: <https://lise.nsl.mscl.msu.edu/lise.html> (дата обращения: 13.01.2025).
37. WolframAlpha [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.wolframalpha.com/> (дата обращения: 13.01.2025).
38. MCNP6 User's Manual. – Los Alamos: Los Alamos National Laboratory, 2013. – LA-CP-13-00634.
39. Chadwick M.B., Obložinský P., Herman M., et al. ENDF/B-VII.1: Nuclear Data for Science and Technology: Cross Sections, Covariances, Fission Product Yields and Decay Data // Nuclear Data Sheets. – 2011. – Т. 112. – С. 2887–2996.

**РЕАКТОРЛЫҚ СӘУЛЕЛЕНУ ЖАҒДАЙЫНДА ЛИТИЙ КЕРАМИКАСЫНЫҢ
БЕТКІ ҚАБАТЫНАН ${}^6\text{Li}(n, \alpha)\text{T}$ ЯДРОЛЫҚ РЕАКЦИЯСЫ НӘТИЖЕСІНДЕ
ТҮЗІЛЕТІН ТРИТИЙ ИОНДАРЫНЫҢ БӨЛІНУІН БАҒАЛАУ**

**Т. В. Кульсартов^{1,2,3}, Д. С. Сайранбаев¹, М. Т. Айтқулов¹, С. Қ. Әскербеков^{1,2},
А. М. Аханов¹, А. Б. Елишенков^{1,2}, Ж. А. Заурбекова^{1,2,3*}, А. А. Шаймерденов¹**

¹ ҚР Атом энергиясы жөніндегі агенттігінің «Ядролық физика институты» РМК, Алматы, Қазақстан

² Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті Эксперименттік және
теориялық физика институты, Алматы, Қазақстан

³ ҚР ҰЯО РМК «Атом энергиясы институты» филиалы, Курчатов, Қазақстан

* Байланыс үшін E-mail: zzha@physics.kz

Литий негізіндегі керамикалардан Li_2TiO_3 реакторлық сәулелену жағдайында бөлінетін тритий иондарының стационарлық ағынын бағалау бойынша аналитикалық нәтижелер ұсынылған. Нейтрон-транспорттық есептеулер MCNP6 бағдарламасында ENDF/B-VII.1 кітапханасын пайдалану арқылы орындалды және керамиканың 650 °C температурасында және жылулық нейтрондардың $5 \cdot 10^{13} \text{ н/см}^2 \text{ с}$ ағынында тіркелген in-situ газбөліну нәтижелерімен салыстырылды. Дайындалған есептік модель ешқандай үйлестіру коэффициенттерін пайдаланбайды және иондардың жүріс ұзындығын, керамикадағы өзін-өзі экрандау әсерін ($\delta = 0,32$) және рекомбинация кезіндегі жоғалтуларды ескереді. Керамикалардың әртүрлі изотоптық құрамы мен тығыздығына сәйкес алынған T^+ ағынының мәндері $3,07 \cdot 10^{-13}$ -тен $1,96 \cdot 10^{-12}$ моль/с аралығында болды. Керамикадағы өзін-өзі экрандау есебінен ағынның максималды төмендеуі 32%-дан аспайды. Есептік және эксперименттік нәтижелер арасындағы НТ компонентасы бойынша алшақтық 15%-дан аспайды, бұл тәсілдің дұрыстығын растайды. Алынған нәтижелер термоядролық реакторлардың бланкеттеріндегі тритий балансын бағалауда практикалық мәнге ие және тритийдің белсендірілмей бөлінуін ескере отырып, керамикалық рәп болдардың құрамын және өлшемін оңтайландыруға мүмкіндік береді.

Түйін сөздер: литий керамикасы, нейтронды сәулелену, тритий, гелий, MCNP6.

EVALUATION OF THE RELEASE OF TRITIUM IONS FORMED IN THE NUCLEAR
REACTION ${}^6\text{Li}(n, \alpha)\text{T}$ FROM THE SURFACE LAYER OF LITHIUM CERAMICS
UNDER REACTOR IRRADIATION CONDITIONS

T. V. Kulsartov^{1,2,3}, D. S. Sairanbaev¹, M. T. Aitkulov¹, S. K. Askerbekov^{1,2},
A. M. Akhanov¹, A. B. Elishenkov^{1,2}, Zh. A. Zaurbekova^{1,2,3*}, A. A. Shaimerdenov¹

¹ RSE “Institute of Nuclear Physics” of the Agency of the Republic of Kazakhstan for Atomic Energy, Almaty, Kazakhstan

² Institute of Experimental and Theoretical Physics, Kazakh National University
named after Al-Farabi, Almaty, Kazakhstan

³ Branch “Institute of Atomic Energy” RSE NNC RK, Kurchatov, Kazakhstan

* E-mail for contacts: zzha@physics.kz

The article presents analytical results on the estimation of the steady-state flux of tritium ions released from lithium-based ceramics Li_2TiO_3 under reactor irradiation conditions at the WWR-K reactor. Neutron transport calculations were performed in MCNP6 using the ENDF/B-VII.1 library and compared with in-situ gas release recorded at a ceramic temperature of 650 °C and a thermal neutron flux of $5 \cdot 10^{13} \text{ n}/(\text{cm}^2 \text{ s})$. The developed calculation model does not contain fitting coefficients and takes into account the ion mean free path, the self-shielding effect in ceramics ($\delta = 0.32$) and recombination losses. The obtained values of T^+ flux from ceramics of different isotopic composition are $3.07 \cdot 10^{-13}$ to $1.96 \cdot 10^{-12} \text{ mol/s}$. The maximum decrease in the flux due to self-shielding in ceramics does not exceed 32%. The discrepancy between the calculation and the experiment for the HT component does not exceed 15%, which confirms the adequacy of the approach. The results are of practical importance in assessing the tritium balance in fusion reactor blankets and allow optimizing the composition and size of ceramic pebbles taking into account the activation-free gas evolution of tritium.

Keywords: lithium ceramics, neutron irradiation, tritium, helium, MCNP6.

<https://doi.org/10.52676/1729-7885-2025-4-88-99>

УДК 53.538.97

РАДИАЦИОННАЯ СТОЙКОСТЬ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ ВАНАДИЯ К СЕГРЕГАЦИИ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ ТЯЖЁЛЫМИ ИОНАМИ КРИПТОНА

И. А. Иванов^{1,2}, Б. С. Аманжолов^{1,2*}, В. В. Углов³, С. В. Злоцкий³, Э. М. Темір^{1,2},
Э. Д. Сапар^{1,2}, Е. О. Унгарбаев^{1,2}, Ке Джин⁴, А. Е. Рыскулов¹

¹ РГП «Институт ядерной физики» Агентства РК по атомной энергии, Алматы, Казахстан

² Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

³ Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

⁴ Пекинский технологический институт, Пекин, Китай

* E-mail для контактов: b.amanzhulov@inp.kz, amanzholovb96@gmail.com

В работе исследовались изменения морфологии и элементного состава сплавов на основе системы V-Nb-Ta-Ti после облучения ионами $^{84}\text{Kr}^{15+}$ с энергией 147 МэВ и флюенсом ионов $1 \cdot 10^{13} - 1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$. Обнаружено, что облучение ионами криптона не привело к значительным повреждениям поверхности образцов V, VNb, VNbTa, VNbTaTi кроме образования тёмных пятен и сколов, размер и количество которых уменьшались от V к VNbTaTi. Анализ методом энергодисперсионной спектроскопии на растровом электронном микроскопе (РЭМ-ЭДС) показал, что состав всех исходных образцов был близким к эквиаtomному. С усложнением состава от VNb к среднеэнтропийному сплаву (СЭС) VNbTa, радиационная сегрегация элементов в образцах увеличилась, но при этом уменьшилась в высокоэнтропийном сплаве (ВЭС) VNbTaTi. Наибольшее изменение концентраций было обнаружено в сплаве VNbTa, где концентрация Ta увеличилась на 18,5% (4,4 ат.% (атомных процентов)) по сравнению с необлученным образцом. Обнаружено, что в сплавах VNbTa и VNbTaTi сегрегация усиливалась с увеличением флюенса, а в VNb сегрегация достигла пика при $1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$, а затем уменьшилась. С помощью анализа методом Резерфордского обратного рассеяния (РОР) показано, что в образцах VNbTa и VNbTaTi, облученных ионами криптона с флюенсом $1 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$ концентрация атомов Ta увеличивалась с глубиной на 33–34% (8,6–12 ат.%) относительно исходной концентрации. Результаты анализа методами ЭДС и РОР показали схожие тенденции. Изменения концентраций элементов в приповерхностном слое VNb, VNbTa и VNbTaTi для тяжёлых элементов Nb, Ta превосходили таковые у лёгких. Различие в сегрегации элементов вероятно связано с разницей в искажении решётки, локальным химическим составом, разной зависимостью миграции атомов V, Nb, Ta, Ti от вакансий и междоузлий. Облучение ионами криптона привело к радиационной сегрегации в СЭС VNbTa и ВЭС VNbTaTi, но распределение элементов по поверхности образцов не образовало выраженных областей сегрегации. ВЭС VNbTaTi проявил большую устойчивость к радиационной сегрегации.

Ключевые слова: высокоэнтропийные сплавы; облучение ионами; радиационные дефекты; радиационная сегрегация; элементный анализ.

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время для увеличения надёжности и срока службы конструкционных материалов новых реакторов IV-го поколения необходима разработка новых материалов с повышенной радиационной стойкостью и прочностью. Они должны сохранять целостность структур и механических свойств при повреждающих дозах радиации до 100–200 смещений-на-атом (сна) и повышенных температурах до 300–1000 °C [1, 2].

Высокоэнтропийные сплавы (ВЭС) и среднеэнтропийные сплавы (СЭС), основанные на тугоплавких металлах с объёмно-центрированной кубической (ОЦК) решёткой, сохраняют высокую твёрдость и прочность при высоких температурах и дозах облучения, устойчивость к коррозии и высокую трещиностойкость [3]. По этим параметрам они могут конкурировать с традиционными сплавами, такими как нержавеющая сталь 316Н [4] и сплав V-4Cr-4Ti [5] и ВЭС на основе гранецентрированной кубической (ГЦК) решетки [3]. Также, элементы V, Cr, Ti, Ta, Hf,

содержащиеся в ОЦК ВЭС, имеют быстрый спад наведённой активности и малое сечение захвата нейтронов по сравнению с Co [3]. Поэтому в последнее время растёт количество исследований посвященных ОЦК ВЭС и СЭС.

ВЭС состоят из четырёх-пяти и более металлов, содержание которых в сплаве близко к эквиаtomному, и находится в диапазоне 5–35 ат.% (атомных процентов). Они образуют разупорядоченные твёрдые растворы замещения. Благодаря высокой конфигурационной энтропии $\Delta S_{\text{конф}} \geq 1,5 R$, в ВЭС минимизируются изменения энергии Гиббса и твёрдый раствор термодинамически устойчив к упорядочиванию при высоких температурах. Среднеэнтропийные сплавы обладают конфигурационной энтропией $1,0 \leq \Delta S_{\text{конф}} \leq 1,5 R$ [3].

Изменения микроструктуры, распад фаз и образование вторичных фаз, радиационная сегрегация возникают при облучении и могут привести к охрупчиванию сплавов. Радиационная сегрегация происходит, когда при облучении распределение атомов оп-

ределённых элементов в мишени отклоняется от исходного вследствие неравномерности потоков атомов мишени и дефектов к стокам, таким как границы зёрен, кластеры дефектов [3].

Большую устойчивость ОЦК ВЭС к радиационной сегрегации по сравнению с обычными сплавами связывают с факторами, которые зависят от сложности состава сплава и типа его элементов.

Первый фактор – зависимость энергии образования дефектов от искажения решётки и локальной химической флуктуации. В ОЦК ВЭС искажение кристаллической решётки больше чем в ГЦК ВЭС, что влияет на энергию образования и стабильность точечных дефектов [3, 6]. В эквивалентных ВЭС, в отличие от неэквивалентных максимально увеличена конфигурационная энтропия и неупорядоченность, из-за чего энергии дефектов больше зависят от локального химического окружения и концентрации определённого элемента [7]. В таких ОЦК ВЭС, как VTaTi, VTaW [7] и VTaCrW [8] междоузлия и их кластеры склонны образовываться из атомов меньшего размера, что приводит к сегрегации атомов V, Cr, а энергии образования вакансий меньше зависят от размера атомов.

Второй фактор – зависимость энергии миграции дефектов от искажения решётки и локальной химической флуктуации. В ВЭС энергии миграции дефектов в связи с меняющимся химическим окружением предстают в виде распределения. Некоторые положения в решетке ВЭС более эффективно захватывают диффундирующие дефекты из-за различающегося локального химического состава и неравномерного распределения энергии миграции, тем самым замедляя перемещение дефектов и способствуя рекомбинации [5, 7]. В ОЦК ВЭС диффузия вакансий становится быстрее, а миграция междоузлий замедляется по сравнению с чистыми металлами [3]. При условии равной диффузии вакансий для элементов сплава, сегрегация зависит от связи междоузлий с атомами, что приводит к сегрегации определенных типов атомов около поверхности, границ зёрен и других стоков. Например, в NbZrTi энергии образования вакансий и междоузлий ниже, диффузия вакансий быстрее, а диффузия междоузлий медленнее, чем в Nb. Атомы Ti быстрее перемещаются за счёт диффузии вместе с междоузлиями чем Nb и Zr [6]. В ВЭС, содержащих V, Cr, поток междоузлий и соответственно их накопление в стоках связан с этими атомами [8], что было подтверждено их обогащением около границ зёрен при облучении WTaCrV [9]. Большее искажение решетки и присутствие локальных химических флуктуаций способствуют замедлению диффузии дефектов, уменьшению разницы в энергиях миграции вакансий и междоузлий, усиливая рекомбинацию дефектов и подавляя образование пустот [6, 7]. Таким образом, искажение решетки и изменения типа ближних атомов влияют на сегрегацию через изменение потока дефектов к стокам.

Третий фактор – ограниченное в объёме рассеивание энергии каскада в ВЭС, так называемый «тепловой пик». Из-за искажения решётки в ВЭС во время каскада у пар Френкеля может быть больше времени и энергии, доступных для рекомбинации дефектов [3]. Кроме того, предполагается, что высокие напряжения в ВЭС между атомами из-за разницы в размерах способствуют аморфизации во время теплового пика и рекристаллизации ВЭС, препятствуя образованию расширенных дефектов, например, дислокаций [10]. Но в таких ОЦК ВЭС как NbZrTi [6] и VTaCrW [8] энергетические барьеры для образования точечных дефектов относительно низки, и последствия взаимодействия этих двух механизмов малоизученны.

Радиационная сегрегация может привести к изменению целостности и желаемых свойств ВЭС, но исследований зависимости сегрегации от типа и количества составляющих элементов было обнаружено мало. Для ГЦК материалов было показано увеличение радиационной стойкости при усложнении состава от Ni к CrFeCoNi за счёт замедления диффузии дефектов [3]. Однако для ОЦК ВЭС было обнаружено меньше подобных исследований, и они фокусировались на влиянии замены 1–2 элементов, например, сравнивая TiVZrTa и TiVNbTa, или сравнении ВЭС с чистыми металлами, такими как V, Nb [6, 11]. Большинство исследований ОЦК ВЭС фокусировалось на влиянии состава на механические свойства, такие как радиационное упрочнение [3].

Также многие исследования по сегрегации проводились при повышенной температуре, когда усиливаются связанные с диффузией процессы рекомбинации и сегрегации [3]. Например, авторы [9] показали, что осаждение в таких сплавах как WTaCrV связано с термодинамическими силами, и сегрегация Cr, V к границам зёрен происходила при начальном отжиге, а облучение усилило её и способствовало образованию выделений данных элементов. При облучении тяжёлыми ионами при низких температурах, развитие кластеров дефектов в ВЭС и обычных металлах/сплавах может быть схоже. Например, при облучении NbTaV и V при 50 К были обнаружены схожие размеры кластеров дефектов [12] а в CoCrMnFeNi и стали 316Н при 573 К наблюдались схожие количественная плотность и размер дислокационных петель [4].

Исходя из этого важно исследовать связь между устойчивостью к сегрегации при облучении и составом ВЭС/СЭС. Облучение ОЦК ВЭС при низкой температуре и разных флюенсах позволит сконцентрироваться на влиянии радиационных процессов на сегрегацию. Таким образом, можно будет создавать сплавы с необходимыми свойствами устойчивые к ухудшению прочностных характеристик при облучении.

В данной статье сплавы на основе V, включая СЭС VNbTa и ВЭС VNbTaTi, были облучены высок-

оэнергетическими ионами криптона. Представлены результаты исследования устойчивости данных сплавов к радиационной сегрегации в зависимости от состава и флюенса ионов.

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Ванадий и его сплавы VNb, VNbTa, и VNbTaTi были получены в Пекинском институте технологий из высокочистых (>99,9%) порошков металлов с помощью электродуговой плавки с последующей гомогенизацией и отжигом при 1150 °C в течение 24 и 72 часов с промежуточной холодной прокаткой [13].

Образцы облучали на ускорителе тяжелых ионов DC-60 в Астанинском филиале Института ядерной физики (Казахстан) [14] ионами криптона $^{84}\text{Kr}^{15+}$ с энергией 147 МэВ с флюенсом ионов $1 \cdot 10^{13} - 1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ при комнатной температуре (КТ). Выбор ионов облучения связан с тем, что ионы криптона возникают в ядерных реакторах деления в качестве продуктов распада ядер, и приводят к разрушению поверхностного слоя материалов реактора.

Для определения состава и распределения элементов по глубине в VNb, VNbTa, и VNbTaTi применялся метод Резерфордского обратного рассеяния (РОР) на коллимированном пучке ионов азота $^{14}\text{N}^{2+}$ с энергией 14 МэВ на циклотроне DC-60. Для регистрации обратно рассеянных ионов применялся полупроводниковый поверхностно-барьерный Au-Si детектор с площадью 50 мм² и разрешением энергии равным $\approx 11 \text{ кэВ}$. Угол регистрации РОР составлял 20° от пучка ионов и нормали к мишени (угол рассеяния 160°). Относительная погрешность элементных концентраций ВЭС составляла менее 6% и была рассчитана из данных эксперимента. Для анализа спектров РОР и расчёта распределения элементов по слоям была использована программа Rutherford Universal Manipulation Program (RUMP) [15].

Морфология и элементный состав поверхности образцов исследовалась методами растровой электронной микроскопии (РЭМ) и энергодисперсионной спектроскопии (РЭМ-ЭДС) на электронном микроскопе Hitachi TM3030. Ускоряющее напряжение составляло 15 кВ, использовался полупроводниковый энергодисперсионный Si (Li) детектор.

Расчёт радиационных повреждений (смещений на-атом, сна) и концентраций имплантированных атомов (атомных процентов, ат.%) был проведён с использованием программы Stopping and Range of Ions in Matter (SRIM-2013) [16] в режиме полного каскада. Пороговые энергии смещения атомов из решётки были взяты равными $E_d(\text{V}) = 40 \text{ эВ}$, $E_d(\text{Nb}) = 60 \text{ эВ}$, $E_d(\text{Ta}) = 90 \text{ эВ}$, $E_d(\text{Ti}) = 30 \text{ эВ}$ [17].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Результаты расчёта в программе SRIM радиационных повреждений в образцах V, VNb, VNbTa и ВЭС VNbTaTi, облученных ионами $^{84}\text{Kr}^{15+}$ с энергией 147 МэВ с флюенсом ионов $1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ представлены на рисунке 1. Согласно расчётам максимум радиа-

ционных повреждений пришёлся на сплавы VNb и VNbTaTi, где пик повреждений был равен около 2,4 сна на глубине 10,4 мкм. В образце V пик повреждений был равен 2 сна и находился на наибольшей глубине – 11 мкм. В VNbTa пик повреждений был равен 2,1 сна и находится на глубине 9,7 мкм. Максимум концентраций имплантированного криптона приблизительно равнялся 0,02 ат.% во всех образцах. Положение пиков повреждений и имплантации смещено относительно V в связи с плотностью, которая наибольшая в VNbTa – около 10,63 г/см³, и наименьшая в ванадии – 5,96 г/см³.

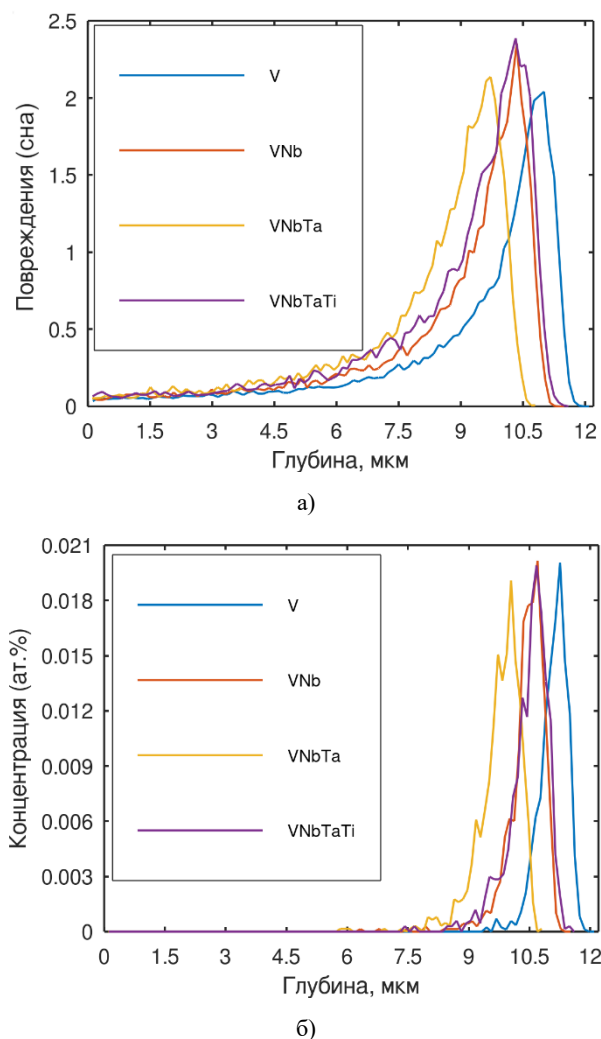


Рисунок 1. Распределение: повреждающей дозы (а) и имплантированного криптона (б) в образцах V, VNb, VNbTa и ВЭС VNbTaTi, облученных ионами $^{84}\text{Kr}^{15+}$ с энергией 147 МэВ с флюенсом ионов $1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$

Согласно расчёту в SRIM пробег ионов Kr с энергией 147 МэВ в VNbTaTi составляет около 10,43 мкм. Преобладают электронные потери энергии, которые составляют 20,39 МэВ/мкм, а ядерные потери равны 55,78 кэВ/мкм. На рисунке 2 показан график величин ионизационных потерь вдоль траектории движения ионов в сплавах в зависимости от

глубины, рассчитанный с помощью программы SRIM-2013. Видно, что при добавлении более тяжёлых элементов (от V к VNbTa) ионизационные потери увеличиваются: в VNbTa они на 16,7% выше, чем в чистом V, а соответствующие кривые смещаются влево – то есть ионы теряют больше энергии в начале пути и расход энергии на ионизацию достигает минимума на меньшей глубине. В сплаве VNbTaTi, напротив, потери на 8,2% ниже по сравнению с VNbTa. Изменение соотношений компонентов в составе данных сплавов оказывает лишь незначительное влияние на величину ионизационных потерь.

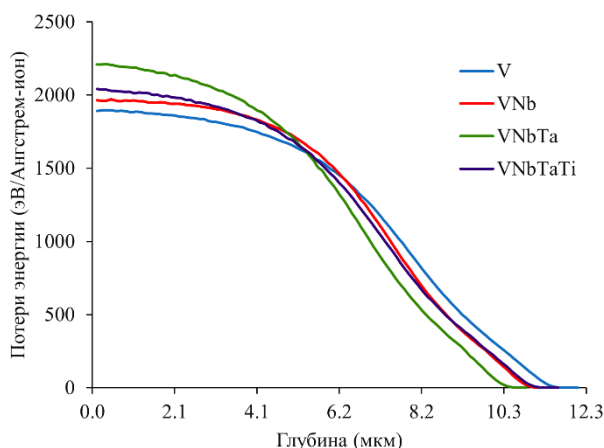


Рисунок 2. Ионизационные потери при облучении V, VNb, VNbTa и VNbTaTi ионами $^{84}\text{Kr}^{15+}$ с энергией 147 МэВ.

На рисунке 3 представлены результаты исследования поверхности образцов, полученные методом растровой электронной микроскопии. Видно, что облучение ионами криптона образцов привело к образ-

ованию на поверхности тёмных дефектов в виде сколов и впадин, которые достигли наибольших размеров (4 мкм) в V. При этом размер и плотность количества сколов уменьшались с увеличением сложности сплава от V к VNbTaTi. Часть дефектов на поверхности образцов была связана с повреждением и распылением поверхности из-за бомбардировки высокоэнергетическими ионами криптона, а другая часть повреждений поверхности, присутствующая на необлученных образцах, вероятно, являлась механической.

Полученные данные свидетельствуют о высокой радиационной стойкости поверхности ВЭС VNbTaTi к облучению высокоэнергетическими ионами криптона. В работе [18] в сплаве Ti-6Al-4V при облучении ионами ^{131}Xe при КТ с флюенсом ионов $2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$ не было обнаружено изменение структуры поверхности. При облучении образца V нейтронами с флюенсом $2 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$ и отжиге [19] образовалось большое количество кластеров дефектов размером менее 100 нм, а их плотность увеличивалась с флюенсом нейтронов. В нашем случае флюенса ионов криптона было недостаточно для образования кластеров.

Рассмотрим влияние облучения ионами криптона на поверхностное распределение элементов в образцах V, VNb, VNbTa и ВЭС VNbTaTi. На рисунке 4 показаны элементные карты распределения в поверхностном слое в необлученных и облученных ионами криптона образцах. Исходные образцы имеют однородное распределение элементов по поверхности. После облучения высокоэнергетическими ионами криптона однородность распределения элементов по поверхности сохранилась.

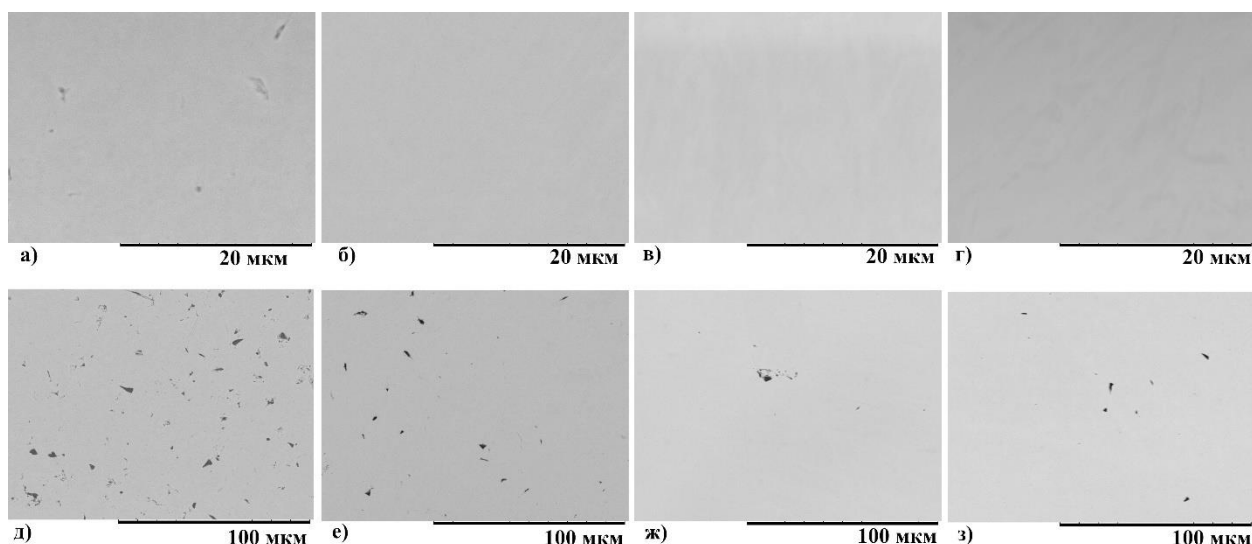


Рисунок 3. РЭМ микрофотографии поверхности образцов V, VNb, VNbTa и ВЭС VNbTaTi (колонки слева направо): необлученных (а–г) и облученных ионами $^{84}\text{Kr}^{15+}$ с энергией 147 МэВ с флюенсом $1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ (д–з)

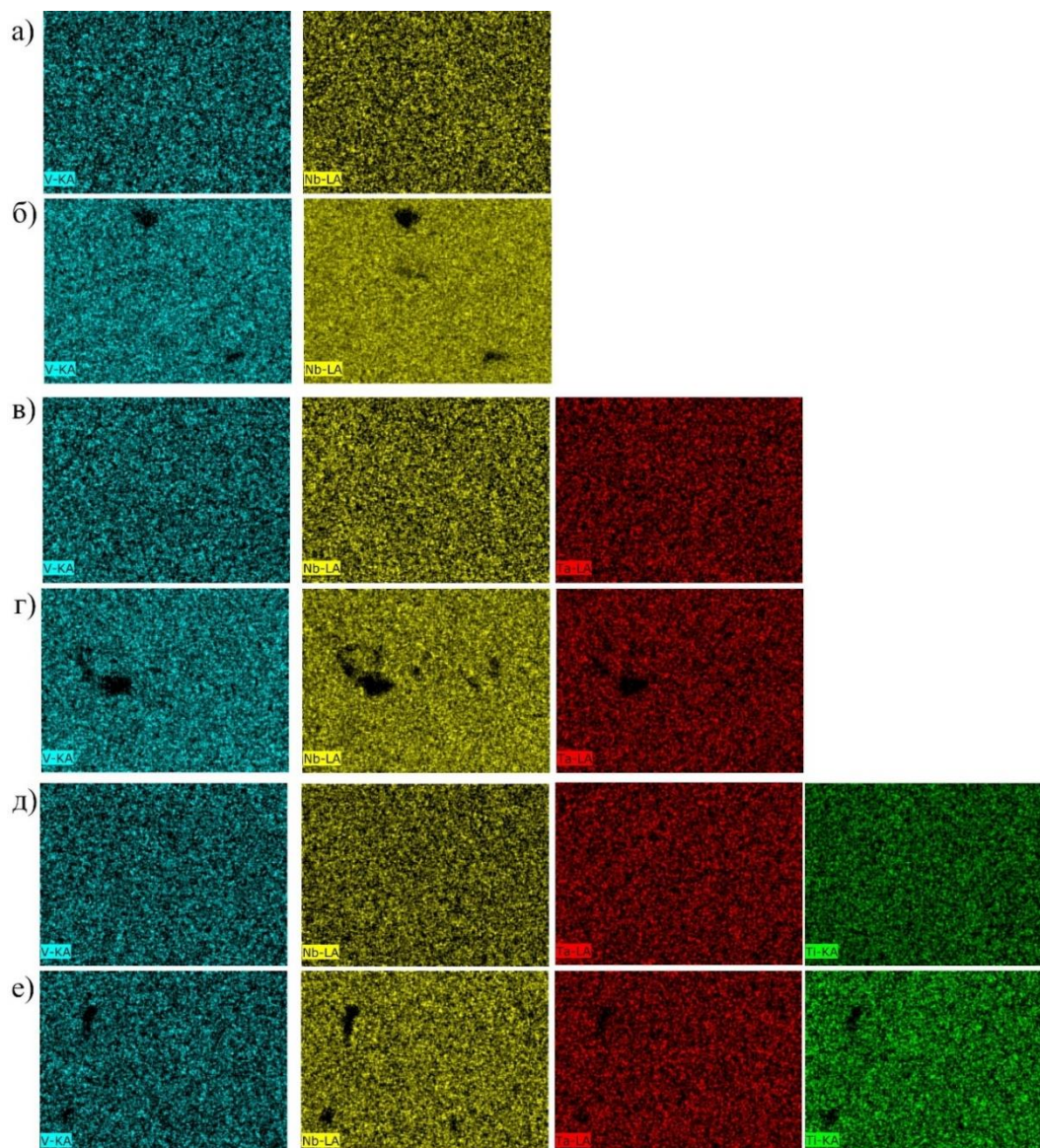


Рисунок 4. РЭМ-ЭДС элементные карты поверхности в необлученных образцах (а, в, д) и облученных ионами $^{84}\text{Kr}^{15+}$ с энергией 147 МэВ с флюенсом $1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ (б, г, е): VNb (а, б), VNbTa (в, г) и VNbTaTi (д, е)

Согласно результатам анализа методом РЭМ-ЭДС, представленным в таблице 1, состав образцов после облучения ионами криптона остался близким к эквиатомному. Таким образом, исследование элементного состава поверхности образцов после облучения ионами криптона методом РЭМ-ЭДС не выявило значительной радиационной сегрегации элементов.

На рисунке 5 представлены относительные изменения концентраций элементов, рассчитанные по данным таблицы 1. Анализ рисунка 5 показал, что в сплаве VNb концентрация V падала, а Nb увеличивалась с ростом флюенса ионов криптона, а наибольшее изменение концентрации элементов в VNb произошло при флюенсе $1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$, достигнув 7,6% (3,8 ат.%). Увеличение флюенса до $1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ привело к уменьшению поверхностной сегрегации в VNb и

изменению концентраций ближе к значениям исходных образцов в пределах погрешности.

Наибольшая сегрегация в VNbTa была выявлена при флюенсе $1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$, когда содержание Ta увеличилось на 18,5% (4,4 ат.%). Концентрация Ta не менялась в пределах погрешности до флюенса $1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$, при этом значения концентрации V и Nb колебались около исходных. В VNbTaTi наибольшая сегрегация была обнаружена при флюенсе $1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$, когда содержание Ta увеличилось на 9,7% (1,8 ат.%). Но в VNbTaTi сегрегация уменьшилась при увеличении флюенса с $1 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$ до $1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$, а затем увеличилась при флюенсе $1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$. В целом, в тройных и четверных сплавах сегрегация усиливалась с флюенсом, а в VNb сегрегация достигла пика при $1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$.

РАДИАЦИОННАЯ СТОЙКОСТЬ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ ВАНАДИЯ К СЕГРЕГАЦИИ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ ТЯЖЁЛЫМИ ИОНАМИ КРИПТОНА

Таблица 1. Концентрации элементов в исходных и облученных ионами криптона $^{84}\text{Kr}^{15+}$ с энергией 147 МэВ образцах, полученные с помощью РЭМ-ЭДС

Образцы	Концентрация элементов, ат.%			
	V	Nb	Ta	Ti
VNb (исходный)	49,9±0,5	50,1±1,1	–	–
VNb ($1 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$)	48,8±0,4	51,2±1,0	–	–
VNb ($1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$)	46,1±0,3	53,9±1,0	–	–
VNb ($1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$)	49,6±0,7	50,4±1,1	–	–
VNbTa (исходный)	36,8±0,1	39,7±0,3	23,5±0,2	–
VNbTa ($1 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$)	34,9±0,1	42,1±0,3	23,0±0,2	–
VNbTa ($1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$)	40,4±0,4	37,1±0,8	22,5±0,8	–
VNbTa ($1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$)	37,4±0,2	34,7±0,3	27,9±0,3	–
VNbTaTi (исходный)	26,0±0,1	27,6±0,2	18,4±0,2	28,0±0,1
VNbTaTi ($1 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$)	24,8±0,1	27,1±0,2	20,2±0,2	28,0±0,1
VNbTaTi ($1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$)	27,6±0,3	26,9±0,7	16,9±0,8	28,7±0,3
VNbTaTi ($1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$)	25,0±0,1	26,1±0,2	20,2±0,2	28,7±0,1

В тройном и четверном сплаве при флюенсе $1 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$ также уменьшались концентрации V, а при более высоких флюенсах наоборот концентрации V увеличивались, а Nb уменьшались. В VNbTaTi наиболее заметной была сегрегация V и Ta, а концентрации Nb и Ti менялись в пределах погрешности. Стоит отметить, что сегрегация более тяжёлого Ta превосходила сегрегацию Ti и V при флюенсе ионов криптона, равном $1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$.

Таким образом, анализ РЭМ-ЭДС показал, что концентрации более лёгких элементов уменьшались или менялись незначительно при высоком флюенсе, а концентрация Ta росла. При этом, распределение элементов по поверхности образцов осталось однородным.

Отдельные области сегрегации не были выявлены, а изменения концентраций элементов в поверхностном слое были в рамках значений из других похожих исследований. Например, при облучении ионами Kr с энергией 145 МэВ с флюенсом ионов $1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$ в VTaTi была обнаружена локальная сег-

регация, достигающая 12,7%, а в HfNbZrTi она достигала 14,2%. В обоих ВЭС образовались кластеры с повышенным содержанием Ti [5]. При облучении W-Ta-Cr-V ионами Kr^{+2} и Cu^{+} с энергией 1–3 МэВ сегрегация Cr и V в выделениях достигала около 75% (30 ат.%) [9].

Согласно расчётам SRIM, основные радиационные повреждения пришлось на глубину около 9,7–11 мкм. Но здесь при 15 кВ напряжения микроскопа РЭМ анализ V, VNb, VNbTa и VNbTaTi методом РЭМ-ЭДС предоставил данные по средней концентрации элементов в образцах на глубине до 1 мкм, где на сегрегацию в меньшей степени влияли радиационные повреждения и имплантация криптона.

Ионы $^{84}\text{Kr}^{15+}$ с энергией 147 МэВ могут считаться быстрыми тяжёлыми ионами, так как имеют энергию более 1 МэВ/а.е.м. (МэВ/атомную единицу массы). Такие ионы теряют большую часть энергии на электронах атомов мишени по сравнению с ядрами, и поэтому в мишени могут возникать треки, происходит локальное плавление, аморфизация [20]. При облучении ионами распределение атомов разных элементов в мишени может меняться посредством имплантации, распыления, каскадного (баллистического) смешивания, миграции дефектов [3, 17]. В ОЦК ВЭС баллистическое изотропное смешивание и рекомбинация дефектов могут конкурировать с меньшей энергией образования дефектов, их большим числом и миграцией к стокам [3]. В данном исследовании предполагалось, что основную роль в изменении концентраций сыграли баллистическое смешивание и миграция дефектов.

В работе [9] при облучении ВЭС W-Ta-Cr-V ионами Kr^{+2} с энергией 1 МэВ с дозой 1,6 сна при температуре 1073 К, и ионами Cu^{+} с энергией 3 МэВ с дозой 8 сна при 1050 К происходит сегрегация V и Cr на границах зёрен с образованием выделений. В наших экспериментах наоборот было обнаружено, что сильнее сегрегируют тяжёлые элементы Nb, Ta.

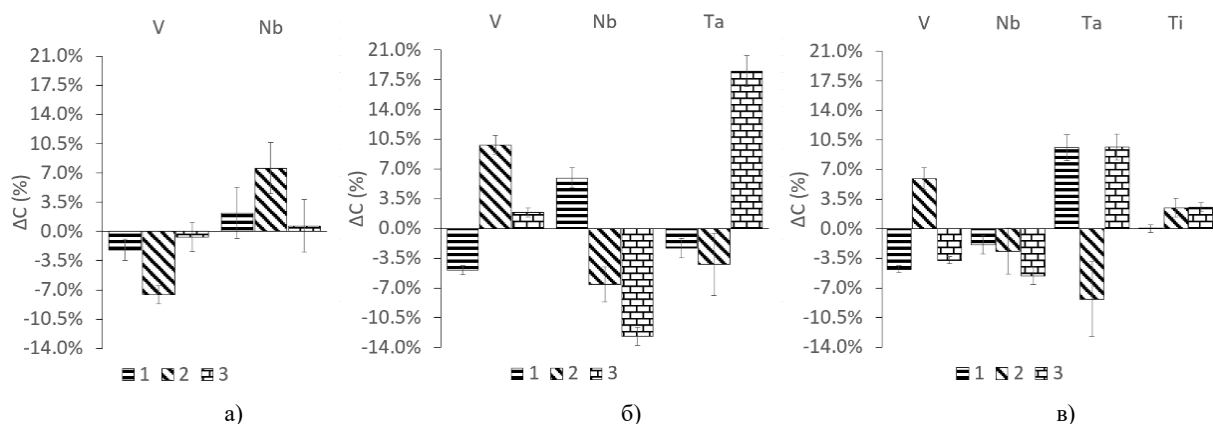


Рисунок 5. Относительные изменения концентраций в образцах VNb, VNbTa и ВЭС VNbTaTi, облученных $^{84}\text{Kr}^{15+}$ с энергией 147 МэВ с флюенсом: $1 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$ (1), $1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$ (2), $1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ (3), согласно РЭМ-ЭДС

В работе [9] из-за более низкой энергии ионов основные повреждения были представлены точечными дефектами, образовавшимися в приповерхностной области (~400 нм), а крупные кластеры, такие как дислокационные петли, не образовались. В таких условиях легкие элементы V, Cr с большей подвижностью могут легче диффундировать к дефектам и сегрегировать. Вдобавок, в работе [9] облучение происходило при высокой температуре, когда в металлах усиливается диффузия вакансий [3].

Согласно исследованиям ВЭС VTaTi, VTaW [7], VTaCrW [8], NbZrTi [6] энергии образования вакансий и междоузлий в ОЦК ВЭС часто схожи и роль энергии миграции дефектов более важна. Диффузия междоузлий может быть ограничена в окрестностях ближних к ним атомов, и они могут рекомбинировать с ближайшими вакансиями, что приводит к образованию кластеров дефектов меньшего размера, чем в обычных сплавах [6, 7]. Согласно моделированию [8], атомам Ta энергетически более выгодно мигрировать за счёт обмена с дефектами типа вакансий, а атомам V и Cr более выгодно образовать межузловые дефекты. Атомы Ti также сильнее связаны с междоузлиями. В целом, предполагается, что развитие дефектов, их миграция, и связанная с ними сегрегация в VNb, VNbTa, VNbTaTi в значительной степени зависели от искажения решётки и локального химического состава.

На рисунке 6 показаны спектры, полученные для образцов с помощью метода POP и описанные с помощью теоретических спектров, полученных в

RUMP. Анализ спектров POP показал, что в исходных образцах элементы были распределены равномерно по всей глубине, равной 1500–1800 нм с концентрациями, представленными в таблице 2.

Таблица 2. Концентрации элементов (ат.%) в исходных образцах, полученные с помощью метода POP

	Глубина (нм)	V	Nb	Ta	Ti
V	1500	100,0	–	–	–
VNb	1500	50,0±3,0	50,0±3,0	–	–
VNbTa	1700	32,0±1,9	33,0±2,0	35,0±2,1	–
VNbTaTi	1800	24,5±1,5	25,5±1,5	26,0±1,6	24,0±1,4

Анализ спектров POP на рисунке 6 для образцов, облученных ионами $^{84}\text{Kr}^{15+}$ с энергией 147 МэВ с флюенсом ионов $1 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$, выявил сегрегацию элементов по глубине. Концентрации, полученные методом POP для V, VNb были схожи со значениями, полученными через РЭМ-ЭДС. Но в VNbTa и VNbTaTi концентрации V, Nb, Ti отличались от значений, полученных методом РЭМ-ЭДС на 6–17% (1,5–6,7 ат.%), а концентрации Ta отличались от значений, полученных методом РЭМ-ЭДС, на 41–49% (7,6–11,5 ат.%). Это вероятно связано с особенностями методов, такими как разные разрешения по плоскости/глубине, зависимость энергии обратно рассеянных ионов от масс элементов, глубина и колебания энергии анализирующих ионов для POP.

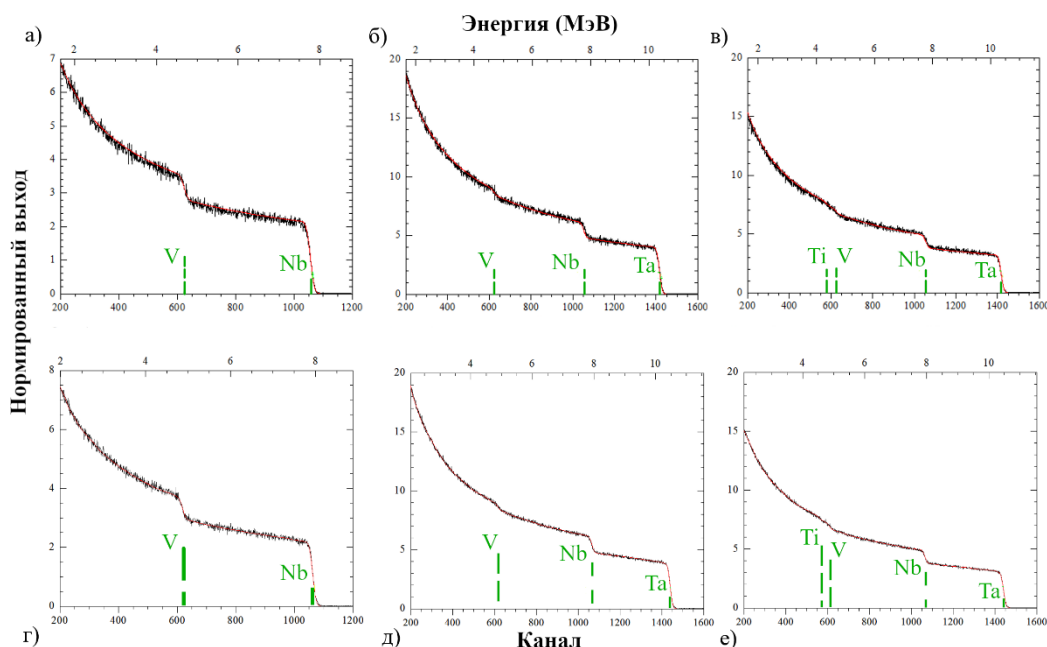


Рисунок 6. Спектры POP: VNb (а, г), VNbTa (б, д), VNbTaTi (в, е), где (а-в) – исходные, (г-е) – облученные ионами $^{84}\text{Kr}^{15+}$ с энергией 147 МэВ с флюенсом $1 \times 10^{13} \text{ см}^{-2}$. Красная линия – спектр RUMP, черная линия – экспериментальный POP спектр

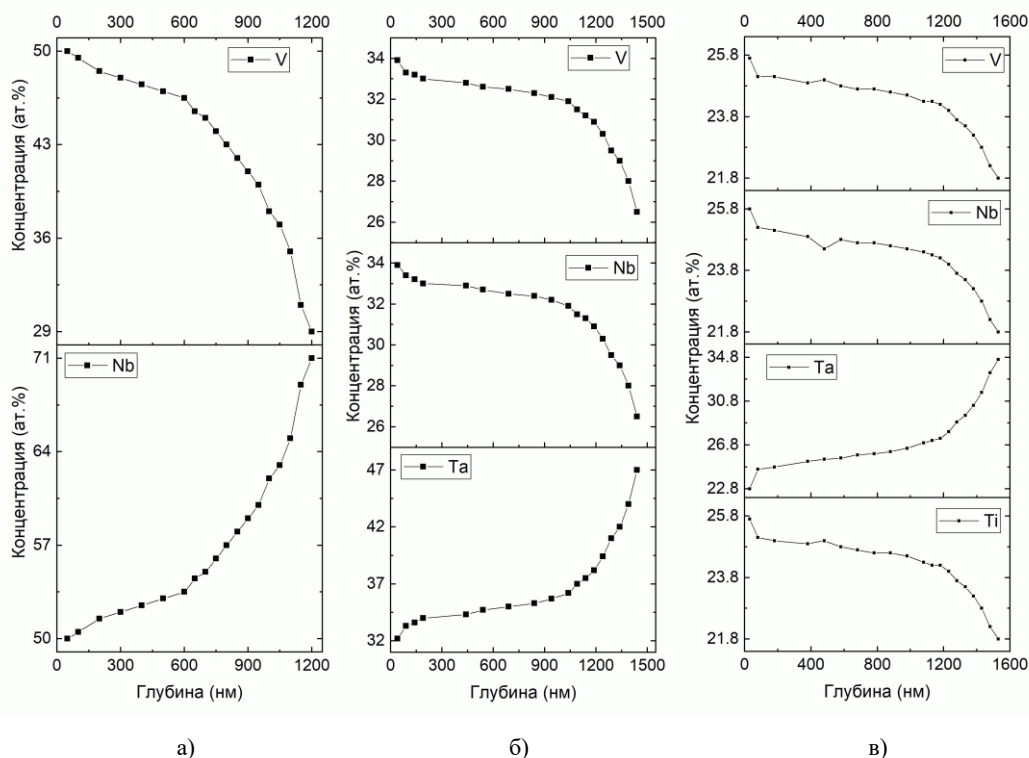


Рисунок 7. Распределение элементов по глубине, согласно анализу результатов POP, в: VNb (а), VNbTa (б) и VNbTaTi (в), облученных ионами $^{84}\text{Kr}^{15+}$ с энергией 147 МэВ с флюенсом $1 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$

Согласно анализу результатов POP, показанных на рисунке 7, концентрации элементов в приповерхностном слое толщиной 30–50 нм в облученных с флюенсом ионов $1 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$ образцах незначительно отличались от исходных образцов. Но с увеличением глубины концентрации элементов менялись. В VNb концентрация V уменьшилась на 42% (21 ат.%), а концентрация Nb увеличилась на 42% (21 ат.%) на глубине 1,2 мкм по сравнению с необлученным образцом. В VNbTa концентрации V, Nb уменьшились, а содержание Ta увеличилось на 34% (12 ат.%) на глубине 1,44 мкм. В VNbTaTi концентрации V, Nb, Ti уменьшались, а содержание Ta увеличилось на 33% (8,6 ат.%) на глубине 1,53 мкм. Результаты анализа образцов методами ЭДС и POP показали схожие тенденции: концентрации более лёгких элементов уменьшались, а концентрации тяжёлых элементов увеличивались.

Были найдены и другие исследования, показавшие сегрегацию лёгких элементов в поверхностном слое с помощью анализа методом POP. При POP-анализе сплава Cu-40% Ni облученного ионами He с энергией 2 МэВ содержание более тяжёлых атомов Cu в приповерхностном слое уменьшалось, а Ni увеличилось на 60% [21]. Также с помощью POP-анализа сплава Ni-12,7 ат.% Si, облученного ионами Kr с энергией 3,25 МэВ при 580 °C и ионами He с энергией 2 МэВ при 556 °C было показано, что около поверхности происходил рост концентраций атомов Si, но облучение ионами гелия привело к большей сег-

регации, чем облучение криптоном. Авторы предположили, что атомы Si были связаны с межузловыми дефектами, замедляя их передвижение по сравнению с вакансиями. При облучении ионами криптона, в области каскада смещений могли происходить как комбинация дефектов, так и образование отдельных стоков и кластеров в глубине мишени, которые повлияли на поток атомов Si к поверхности. Считалось, что распыление и ионное смешивание не внесли значительный вклад в сегрегацию [22].

Таким образом, предлагается два возможных объяснения увеличения концентраций тантала Ta на глубинах 1000–1500 нм. Первое предположение – при облучении происходил отток атомов Ta в более глубокие слои мишени так как в приповерхностном слое образовалось достаточное количество вакансий. Но согласно расчётам, радиационные повреждения при энергии криптона 147 МэВ росли с глубиной мишени. Второе предположение – обогащение связано с оттоком атомов Ta ближе к поверхности образцов вследствие образования большого количества дефектов вакансионного типа глубже 1,5 мкм. Как было отмечено ранее, концентрации атомов V, Nb, Ti на глубине в большей степени зависят от межузловых дефектов, и вероятно, поэтому менялось незначительно, приводя к уменьшению их концентраций относительно Ta.

Принимая во внимание то, что метод POP в данном случае был ограничен глубиной около 1,5 мкм, где радиационные повреждения были минимальны

согласно расчётам, здесь перечислены несколько причин применения метода. Во-первых, у метода РОР с более тяжёлыми ионами азота разрешение по массе и глубине для тяжёлых элементов выше по сравнению с ионами гелия. Во-вторых, этот метод дополняет метод РЭМ-ЭДС и предоставляет информацию о послойном распределении элементов. Методы РОР и РЭМ-ЭДС уже использовались для таких ВЭС как CoCrFeMnNi [23], что позволит провести сравнение сегрегации при различных условиях облучения и с другими ВЭС. В-третьих, в других работах было показано, что повреждения на большей глубине могут влиять на распределение дефектов за счёт диффузии атомов и дефектов к поверхности и соответственно влияют на сегрегацию на меньшей глубине. Например, в работе [24] при облучении NiCoFeCr ионами Ni с энергией 3 МэВ до 120 сна при 580 °С изменения концентраций с переходом от глубины 100 нм до 900 нм достигали около 8–10 ат. % (30% от концентраций матрицы). Авторы объясняли это избирательной диффузией и тем, что вакансии мигрировали глубже за счёт обмена с атомами Fe, Cr, которые смещались ближе к поверхности, а атомы Ni, Co диффундировали через междоузлия и собирались около дислокаций [24]. В дальнейшем рекомендуется применение таких методов, как например, просвечивающая электронная микроскопия (ПЭМ), РЭМ анализ продольного сечения образцов, позитронная аннигиляционная спектроскопия (ПАС) для детального изучения распределения и типа дефектов в исходных и облученных образцах. С целью изучения образования дефектов, возможно, следует провести расчёт плотности дислокаций. Также планируется измерение твёрдости для изучения влияния дефектов и сегрегации на радиационное упрочнение.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1) В рамках данного исследования для чистого V и сплавов VNb, VNbTa, VNbTaTi облученных ионами криптона $^{84}\text{Kr}^{15+}$ с энергией 147 МэВ были получены следующие результаты:

2) Согласно результатам анализа методом РЭМ облучение ионами криптона не приводит к значительным повреждениям поверхности образцов. Но было обнаружено образование тёмных пятен и сколов. Размер и плотность количества сколов уменьшаются от V к VNbTaTi.

3) РЭМ-ЭДС анализ поверхности образцов показал, что при облучении ионами криптона происходила сегрегация, но состав сплавов оставался близким к эквивалентному. В VNbTa и VNbTaTi сегрегация усиливалась с увеличением флюенса, а в VNb сегрегация достигла пика при $1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$. При облучении VNb концентрации V падали, а Nb увеличивались на 7,6% (3,8 ат. %) при флюенсе $1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$. Наибольшая сегрегация среди образцов была обнаружена в VNbTa при флюенсе $1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$, когда содержание Ta увеличилось на 18,5% (4,4 ат. %). В VNbTaTi наибольшая сегрегация была достигнута при флюенсе $1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$,

когда концентрация Ta увеличилась на 9,7% (1,8 ат. %). С усложнением состава от VNb к VNbTa, радиационная сегрегация элементов образцов увеличивалась, но уменьшилась в VNbTaTi. В тройных и четверных сплавах изменения концентрации Ta превосходили изменения для более лёгких элементов.

4) Анализ результатов, полученных методом РОР, показал, что концентрации для VNb были схожи со значениями, полученными методом РЭМ-ЭДС, но концентрации для образцов VNbTa и VNbTaTi отличались. Концентрации на поверхности образцов, облученных с флюенсом $1 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$ были близки к исходным, но менялись монотонно с глубиной. В VNbTa и VNbTaTi концентрация Ta увеличилась на 33–34% (8,6–12 ат. %) на наибольшей глубине относительно необлученных образцов, что было меньше чем в VNb, где концентрация Nb увеличилась на 42% (21 ат. %). Результаты анализа ЭДС и РОР показали схожие тенденции: концентрации более лёгких элементов уменьшились, а концентрации тяжёлых элементов увеличивались.

5) Предполагается, что развитие дефектов и их миграция в VNb, VNbTa, VNbTaTi в значительной степени зависят от искажения решётки и локального химического состава. Различие в сегрегации элементов в VNb, VNbTa, VNbTaTi вероятно связано с тем, что изменение концентраций атомов V, Nb, Ti в большей степени зависит от поведения межузловых дефектов, а Ta от вакансий.

6) Было показано, что ВЭС VNbTaTi менее подвержен радиационной сегрегации, чем СЭС VNbTa.

Благодарности

Данное исследование финансировалось Комитетом науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (грант № AP19579188) и Министерством энергетики Республики Казахстан (Программа BR23891530 «Развитие комплексных научных исследований в области ядерной и радиационной физики на базе казахстанских ускорительных комплексов»).

ЛИТЕРАТУРА / REFERENCES

1. Zinkle S. J., Tanigawa H., Wirth B. D. Radiation and Thermomechanical Degradation Effects in Reactor Structural Alloys // Structural Alloys for Nuclear Energy Applications: Elsevier, 2019. P. 163–210.
2. English C. A., Hyde J. M., Odette G. R., Lucas G. E., Tan L. Research Tools: Microstructure, Mechanical Properties, and Computational Thermodynamics // Structural Alloys for Nuclear Energy Applications: Elsevier, 2019. P. 103–161.
3. Pickering E. J., Carruthers A. W., Barron P. J., Middleburgh S. C., Armstrong D. E. J., Gandy A. S. High-Entropy Alloys for Advanced Nuclear Applications // Entropy. – 2021. – Vol. 23, No. 1. – P. 98.
4. Chen W.-Y., Liu X., Chen Y., Yeh J.-W., Tseng K.-K., Natesan K. Irradiation effects in high entropy alloys and 316H stainless steel at 300 °C // Journal of Nuclear Materials. – 2018. – Vol. 510. – P. 421–430.

5. Zhu Z., Chen S., Zhang Q., Li L., Zhao Y., Guo X., Uglov V. V., Jin K., Xue Y. Suppressed defect production and hardening in refractory high entropy alloys under ion irradiation at early stage: A comparative study between VTaTi, HfNbZrTi, and conventional V-4Cr-4Ti // *Journal of Materials Science & Technology*. – 2025. – Vol. 235. – P. 1–11.
6. Shi T., Su Z., Li J., Liu C., Yang J., He X., Yun D., Peng Q., Lu C. Distinct point defect behaviours in body-centered cubic medium-entropy alloy NbZrTi induced by severe lattice distortion // *Acta Materialia*. – 2022. – Vol. 229. – P. 117806.
7. Zhao S., Xiong Y., Ma S., Zhang J., Xu B., Kai J.-J. Defect accumulation and evolution in refractory multi-principal element alloys // *Acta Materialia*. – 2021. – Vol. 219. – P. 117233.
8. Zhao S. Defect properties in a VTaCrW equiatomic high entropy alloy (HEA) with the body centered cubic (bcc) structure // *Journal of Materials Science & Technology*. – 2020. – Vol. 44. – P. 133–139.
9. El-Atwani O., Li N., Li M., Devaraj A., Baldwin J. K. S., Schneider M. M., Sobieraj D., Wróbel J. S., Nguyen-Manh D., Maloy S. A., Martinez E. Outstanding radiation resistance of tungsten-based high-entropy alloys // *Sci. Adv.* – 2019. – Vol. 5, No. 3. – P. eaav2002.
10. Egami T., Guo W., Rack P. D., Nagase T. Irradiation Resistance of Multicomponent Alloys // *Metall Mater Trans A*. – 2014. – Vol. 45, No. 1. – P. 180–183.
11. Kareer A., Waite J. C., Li B., Couet A., Armstrong D. E. J., Wilkinson A. J. Short communication: ‘Low activation, refractory, high entropy alloys for nuclear applications’ // *Journal of Nuclear Materials*. – 2019. – Vol. 526. – P. 151744.
12. Parkin C., Moorehead M., Elbakhshwan M., Hu J., Chen W.-Y., Li M., He L., Sridharan K., Couet A. In situ microstructural evolution in face-centered and body-centered cubic complex concentrated solid-solution alloys under heavy ion irradiation // *Acta Materialia*. – 2020. – Vol. 198. – P. 85–99.
13. Uglov V. V., Zlotski S. V., Belov M. M., Ryskulov A. E., Jin K., Ivanov I. A., Kurakhmedov A. E., Mustafin D. A., Sapar A. D., Bikhert Y. V. Structural and Phase Changes in Concentrated V–Nb–Ta–Ti Solid Solutions Irradiated by Helium Ions // *J. Surf. Investig.* – 2023. – Vol. 17, No. 1. – P. 208–215.
14. Zdorovets M., Ivanov I., Koloberdin M., Kozin S., Alexandrenko V., Sambaev E., Kurakhmedov A., Ryskulov A. Accelerator complex based on DC-60 cyclotron. Obninsk: Joint Accelerator Conferences Website (JACoW), 2014. P. 287–289.
15. Doolittle L. R. Algorithms for the rapid simulation of Rutherford backscattering spectra // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. – 1985. – Vol. 9, No. 3. – P. 344–351.
16. Ziegler J. F., Ziegler M. D., Biersack J. P. SRIM – The stopping and range of ions in matter (2010) // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. – 2010. – Vol. 268, No. 11–12. – P. 1818–1823.
17. Was G. S. Fundamentals of radiation materials science: metals and alloys. New York: Springer, 2007. – 827 p.
18. Amroussia A., Avilov M., Boehlert C. J., Durantel F., Grygiel C., Mittag W., Monnet I., Pellemoine F. Swift heavy ion irradiation damage in Ti–6Al–4V and Ti–6Al–4V–1B: Study of the microstructure and mechanical properties // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. – 2015. – Vol. 365. – P. 515–521.
19. Shiraishi K., Fukaya K., Katano Y. Radiation and anneal hardening in neutron-irradiated vanadium // *Journal of Nuclear Materials*. – 1974. – Vol. 54, No. 2. – P. 275–285.
20. Komarov F. F. Nano- and microstructuring of solids by swift heavy ions // *Phys.-Usp.* – 2017. – Vol. 60, No. 5. – P. 435–471.
21. Averbach R. S., Rehn L. E., Wagner W., Okamoto P. R., Wiedersich H. In situ Rutherford backscattering analysis of radiation-induced segregation // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*. – 1982. – Vol. 194, No. 1–3. – P. 457–460.
22. Averbach R. S., Rehn L. E., Wagner W., Ehrhart P. The effect of primary recoil spectrum on radiation induced segregation in nickel-silicon alloys // *Journal of Nuclear Materials*. – 1983. – Vol. 118, No. 1. – P. 83–90.
23. Amanzhulov B., Ivanov I., Uglov V., Zlotski S., Ryskulov A., Kurakhmedov A., Koloberdin M., Zdorovets M. Composition and Structure of NiCoFeCr and NiCoFeCrMn High-Entropy Alloys Irradiated by Helium Ions // *Materials*. – 2023. – Vol. 16, № 10. – P. 3695.
24. Fan Z., Zhong W., Jin K., Bei H., Osetsky Y. N., Zhang Y. Diffusion-mediated chemical concentration variation and void evolution in ion-irradiated NiCoFeCr high-entropy alloy // *Journal of Materials Research*. – 2021. – Vol. 36, № 1. – P. 298–310.

ВАНАДИЙ НЕГІЗІНДЕГІ ҚОРЫТПАЛАРДЫҢ АУЫР КРИПТОН ИОНДАРЫМЕН
СӘУЛЕЛЕНДІРУ КЕЗІНДЕГІ СЕГРЕГАЦИЯҒА РАДИАЦИЯЛЫҚ ТӨЗІМДІЛІГІ

И. А. Иванов^{1,2}, Б. С. Аманжулов^{1,2*}, В. В. Углов³, С. В. Злоцкий³, Ә. М. Темір^{1,2},
Ә. Д. Сапар^{1,2}, Е. О. Оңғарбаев^{1,2}, Ке Джин⁴, А. Е. Рысқұлов¹

¹ ҚР Атом энергиясы жөніндегі агенттігі «Ядролық физика институты» РМК, Алматы, Қазақстан

² Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

³ Беларусь мемлекеттік университеті, Минск, Беларусь

⁴ Пекин технологиялық институты, Пекин, Қытай

* Байланыс үшін E-mail: b.amanzhulov@inp.kz, amanzholovb96@gmail.com

Осы зерттеуде энергиясы 147 МэВ-ке тең $^{84}\text{Kr}^{15+}$ иондарымен және $1 \cdot 10^{13} - 1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ -ге тең иондық флюенспен сәулелендіруден кейін V-Nb-Ta-Ti жүйесі негізіндегі қорытпалардың морфологиясы мен элементтік құрамының өзгеруі зерттелді. Криптон иондарымен сәулелендіру V, VNb, VNbTa, VNbTaTi үлгілерінің беткі қабатының айтарлықтай зақымдануына әкелмегені анықталды. Тек V-ден VNbTaTi-ге қарай мөлшері мен саны төмендеген қара дақтар мен жарықшақтар түзілді. Сканерлейтін электрондық микроскоптың энергодисперсиялық спектроскопиясы (СЭМ-ЭДС) талдауы барлық бастапқы үлгілердің құрамы эквиваленттік құрамға ұқсас екенін көрсетті. Құрам күрделілігінің VNb қорытпасынан VNbTa орташа энтропиялық қорытпасына (ОЭҚ) дейін жоғарылауымен үлгілердегі элементтердің радиациялық сегрегациясы өсті, бірақ VNbTaTi жоғары энтропиялық қорытпасында (ЖЭҚ) төмендеді. Концентрациялардың ең үлкен өзгерісі VNbTa қорытпасында табылды, онда Ta концентрациясы сәулеленбеген үлгімен салыстырғанда 18,5%-ға (4,4 ат.% (атомдық пайыз)) өсті. VNbTa және VNbTaTi қорытпаларында сегрегацияның флюенстің жоғарылауымен бірге күшейетіні, ал VNb-де сегрегация $1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$ флюенсте шыңына жетіп, кейін төмендегені анықталды. Резерфордтың Кері Шашырауы (РКШ) талдауын қолдана отырып, флюенсі $1 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$ криптон иондарымен сәулелендірілген үлгілерде Ta атомдарының концентрациясы тереңдікте бастапқы концентрациямен салыстырғанда 33–34%-ға (8,6–12 ат.%) артқанын көрсетті. СЭМ-ЭДС және РКШ талдауларының нәтижелері ұқсас үрдістерді көрсетті. VNb, VNbTa және VNbTaTi үлгілерінің беткі қабатта ауыр Nb, Ta элементтері үшін концентрацияларының өзгеруі жеңіл элементтерден асып түсті. Элементтердің сегрегациясындағы айырмашылық тордың бұрмалануының айырмашылығына, жергілікті химиялық құрамға, V, Nb, Ta, Ti атомдарының миграциясының вакансиялар мен түйінаралықтарға әртүрлі тәуелділігіне байланысты болуы ықтимал. Криптон иондарымен сәулелену VNbTa ОЭҚ және VNbTaTi ЖЭҚ-да радиациялық сегрегацияға әкелді, бірақ элементтердің үлгілер бетінде таралуы айқын сегрегация аймақтарын құрмады. VNbTaTi ЖЭҚ радиациялық сегрегацияға үлкенірек төзімділік көрсетті.

Түйін сөздер: жоғары энтропиялық қорытпалар; иондармен сәулелендіру; радиациялық ақаулар; радиациялық сегрегация; элементтік талдау.

RESISTANCE OF VANADIUM-BASED ALLOYS TO RADIATION-INDUCED SEGREGATION
UNDER IRRADIATION WITH HEAVY KRYPTON IONS

I. A. Ivanov^{1,2}, B. S. Amanzhulov^{1,2*}, V. V. Uglov³, S. V. Zlotski³, A. M. Temir^{1,2},
A. D. Sapar^{1,2}, Y. O. Ungarbayev^{1,2}, Ke Jin⁴, A. E Ryskulov¹

¹ RSE «Institute of nuclear physics» of the Agency of the RK for Atomic Energy, Almaty, Kazakhstan

² L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

³ Belarusian State University, Minsk, Belarus

⁴ Beijing Institute of Technology, Beijing, China

* E-mail for contacts: b.amanzhulov@inp.kz, amanzholovb96@gmail.com

This work investigated changes in the morphology and elemental composition of alloys based on the V-Nb-Ta-Ti system after irradiation with $^{84}\text{Kr}^{15+}$ ions with an energy of 147 MeV and an ion fluence of $1 \cdot 10^{13}$ – $1 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$. It was found that irradiation with krypton ions did not lead to significant damage to the surface of V, VNb, VNbTa, VNbTaTi samples, except for the formation of dark spots and chips, the size and number of which decreased from V to VNbTaTi. Scanning electron microscopy energy dispersive spectroscopy (SEM-EDS) analysis showed that the composition of all the initial samples was close to equiatomic. With increasing composition complexity from VNb to the medium entropy alloy (MEA) VNbTa, the radiation-induced segregation of elements in the samples increased, but decreased in the high-entropy alloy (HEA) VNbTaTi. The largest change in concentrations was found in VNbTa, where the Ta concentration increased by 18.5% (4.4 at.% (atomic percents)) compared to the unirradiated sample. It was found that in VNbTa and VNbTaTi, the segregation increased with increasing fluence, and in VNb, the segregation peaked at $1 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ and then decreased. Using the Rutherford backscattering (RBS) analysis, it was shown that in samples irradiated with krypton ions with a fluence of $1 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, the concentration of Ta atoms increased with depth by 33–34% (8.6–12 at.%) relative to the initial concentration. The results of the EDS and RBS analysis showed similar trends. Changes in the concentrations of elements in the near-surface layer of VNb, VNbTa and VNbTaTi for heavy elements Nb, Ta exceeded those for the light ones. The difference in the segregation of elements is probably due to the difference in lattice distortion, local chemical composition, different dependence of the migration of V, Nb, Ta, Ti atoms on vacancies and interstitials. Irradiation with krypton ions resulted in segregation in VNbTa MEA and VNbTaTi HEA, but the distribution of elements over the surface of the samples did not form distinct segregation regions. VNbTaTi HEA showed greater resistance to radiation-induced segregation.

Keywords: high-entropy alloys; ion irradiation; radiation defects; radiation-induced segregation; elemental analysis.

<https://doi.org/10.52676/1729-7885-2025-4-100-106>

УДК 658.264

ASSESSMENT OF WATER TREATMENT QUALITY AT THE WATER TREATMENT COMPLEX OF TPP-1 IN THE CITY OF SEMEY

A. R. Khazhidinova^{1*}, A. S. Khazhidinov², S. L. Elistratov³

¹ *Shakarim University, Semey, Kazakhstan*

² *Center of Nuclear Medicine and Oncology, Semey, Kazakhstan*

³ *Novosibirsk State Technical University, Novosibirsk, Russia*

* E-mail for contacts: khazhidinova1991@mail.ru

Reliable and efficient operation of thermal power plants is impossible without high-quality water treatment. This is particularly important for facilities that use natural water sources characterized by high turbidity, suspended solids, and dissolved gases. This study examines the three-stage water treatment system used at the Semey TPP-1. The aim was to evaluate the effectiveness of each stage of water purification: mechanical filtration, sodium-cation softening, and thermal degassing. The study included instrumental assessment of water quality before and after each treatment stage, visual inspection of the equipment, and analysis of operational documentation. The results demonstrate a high level of purification: anthracite-loaded mechanical filters reduce turbidity by more than 95%, sodium-cation exchange units lower hardness from 12 mg-eq/L to 0.05 mg-eq/L, and the deaerator reduces dissolved oxygen concentration to ≤ 0.05 mg/L. It is shown that adherence to technological parameters – such as filter loading levels, regeneration regimes, and backwashing intensity – directly affects purification efficiency and equipment durability. The findings confirm that the quality of treated water meets regulatory requirements for boiler feedwater. Based on the measurement results, a quantitative assessment was made of the performance efficiency of each unit in the water treatment system. These results can be used in the design and modernization of water treatment systems at similar thermal power facilities and provide practical value for developing engineering competencies in operating power equipment and water-chemical regimes.

Keywords: *water treatment, mechanical filter, anthracite, sodium cation exchange filter, deaerator, water quality.*

INTRODUCTION

Water treatment is one of the key elements in ensuring the reliable and efficient operation of thermal power facilities. The quality of water used in thermal power facilities directly affects the provision of electricity, hot water supply, and heating to the population. Furthermore, an adequate level of water treatment is essential for the preservation of equipment [1–4]. Malfunctions in the water treatment process can lead to significant technological and economic losses. Figure 1 shows the potential consequences of inadequate water purification at thermal power plants.

Multi-stage water treatment systems are widely used at thermal power plants. These typically include mechanical filtration, ion exchange, thermal deaeration, and, in some cases, membrane technologies. Each stage plays a specific role in removing suspended solids, hardness salts, dissolved gases, and organic compounds [5].

In recent years, a number of studies have been published addressing water treatment issues at thermal power facilities, including water hardness, suspended solids content, and the application of various filtration and ion-exchange methods [6–8]. For instance, Zaharia and Stanculescu [7] examined water treatment processes with emphasis on sludge formation and disposal, while Fajri et al. [6] analyzed river water hardness in relation to demineralization processes at a thermal power plant. Tsukakizaki et al. [8] discussed general approaches to water

quality control in thermal power plants. However, these studies mainly focus on specific aspects or generalized schemes. Comprehensive assessments of the performance of existing water treatment systems under the conditions of specific plants remain insufficiently covered, which highlights the necessity of the present study on the example of TPP-1 in Semey.

The aim of this study is to analyze the design, operating principles, and efficiency of the water treatment equipment in use at TPP-1 in the city of Semey, taking into account the quality of the raw water and the requirements for feedwater parameters in thermal power systems.

The water intake for TPP-1 is sourced from the Irtysh River. The quality of water in the Irtysh River often does not meet established standards, as it contains a significant amount of impurities and suspended substances, necessitating strict control of boiler water treatment. As it passes through the intake structure, the hardness of the water increases.

The water treatment system at TPP-1 is a three-stage process, with each stage performing a specific function in achieving the required water quality. It includes:

- 1) A mechanical filter for removing suspended and insoluble mechanical impurities;
- 2) First- and second-stage sodium-cation exchange filters for water softening;
- 3) A deaerator that removes dissolved gases.

ASSESSMENT OF WATER TREATMENT QUALITY AT THE WATER TREATMENT COMPLEX OF TPP-1 IN THE CITY OF SEMEY

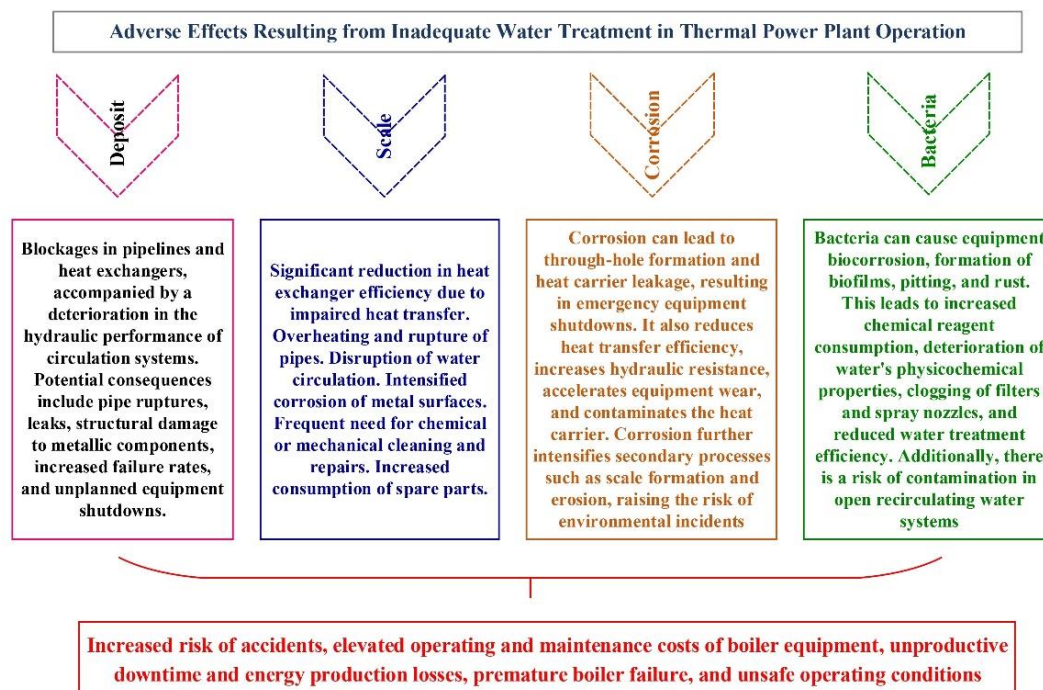


Figure 1. Potential consequences of inadequate water treatment at thermal power plants

The novelty of this study lies in the fact that, for the first time, a comprehensive analysis of the water treatment system operation at TPP-1 in the city of Semey was carried out under real operating conditions based on data obtained directly at the plant. Unlike general descriptions of standard water treatment schemes, this study examines the actual quality of water at the intake point and its changes after each treatment stage, taking into account the local hydrochemical characteristics of the Irtysh River basin and the specific features of the intake facilities. This approach makes it possible to identify the most critical purification stages and to assess their efficiency under the actual operating conditions of the plant.

METHODS

The study of the water treatment process was conducted at the operating water treatment complex of the TPP-1 thermal power plant in the city of Semey, which provides feedwater treatment for the water-steam path of the boiler equipment. The aim of the research was to assess the effectiveness of the main stages of water purification under real operating conditions.

The methodology included an engineering and technological survey of the water treatment scheme, analysis of operational documentation, visual inspection of the equipment, as well as instrumental measurements of water quality indicators before and after passing through individual treatment stages.

The quality indicators of technical water were determined in accordance with state standards (GOST) and standard laboratory procedures used at thermal power plants. Turbidity was measured in accordance with the national standard ST RK ISO 7027–2007 “Water quality. Determination of turbidity” using a HACH 2100N

turbidimeter [9]. The concentration of suspended solids was determined in accordance with the standard ST RK 3865–2023 “Industrial waters of thermal power plants. Determination of suspended solids by gravimetric method” [10].

Total hardness, as well as calcium and magnesium concentrations, were determined by manual complexometric titration with EDTA (Trilon B) in accordance with GOST 31954-2012 in the laboratory of TPP-1 [11]. Dissolved oxygen was measured manually by the Winkler iodometric method in accordance with the standard ST RK 2518–2014 “Water quality. Methods for determination of dissolved oxygen” [12]. Free CO₂ was determined manually by acid–base titration in accordance with GOST 23268.5-78 [13].

Particular attention was paid to evaluating the sequence of purification processes, the reliability of equipment operation, and the degree to which the water quality characteristics complied with established standards.

Water quality parameters were monitored using standard sampling devices installed at the inlet and outlet of the main process units: mechanical filters, sodium-cation exchange filters of stages I and II, and the atmospheric deaerator.

The sampling points included pipelines for sample collection, shut-off valves, and pressure gauge devices, allowing for real-time control of pressure drops before and after the treatment equipment.

The data were analyzed in comparison with regulatory requirements for feed and makeup water quality in heat supply systems, as well as with the parameters necessary to ensure corrosion and scale formation safety in the water-steam circuit of the boilers.

RESULTS AND DISCUSSION

Figure 2 shows the schematic diagram of a mechanical water filter. The mechanical filter is a structurally simple and reliable device designed for the primary removal of mechanical impurities from water [14]. The description of the filter in this study is based on actual inspection data from the equipment at TPP-1 in Semey, and the reference to Zhao et al. [14] is cited exclusively as an example to illustrate the general characteristics and operating principles of similar filters. The filter is constructed as a vertical cylindrical structure made of monolithic reinforced concrete. The rigidity and strength of the concrete housing allow the filter to operate under variable hydraulic loads and pressure differentials typical of industrial water treatment systems.

The filtering medium used is anthracite – a high-carbon filtration material characterized by abrasion resistance, chemical inertness, and a large specific surface area. The values “900” and “500” shown in Figure 2 indicate the height of the anthracite layer and the distance to the upper distribution pipe, in millimeters. The grain size and bed height of the anthracite are selected to ensure an optimal filtration rate while achieving a high degree of suspended solids removal.

The design of the mechanical filter includes the option for backwashing, during which accumulated contaminants are removed from the filter bed by reversing the flow of water. The absence of chemical reagents at this stage significantly reduces the overall cost of water treatment [14].

During operation, the raw water is fed into the upper part of the filter (Figure 2). To prevent air lock formation and ensure uniform flow distribution, special air release and pressure equalization slots are integrated into the upper section of the structure. This design solution helps avoid uneven filtration, thereby improving the efficiency of the device [6]. After passing through the anthracite layer, the filtered water flows into the lower part of the filter, from where it is directed to the next treatment stage – the first-stage sodium cation exchange filter.

Table 1 presents the water quality indicators before and after passing through the mechanical filter.

Table 1. Water quality indicators before and after the mechanical filter

Water Quality Parameters	Before treatment	After treatment
Turbidity, NTU	45÷65	0,6
Suspended solids concentration, mg/L	130÷210	<5

The analysis of the obtained results indicates a high degree of water purification from mechanical contaminants in mechanical filters – over 96% for both parameters. Effective removal of suspended solids at this stage significantly increases the lifespan of subsequent filters, prevents their fouling, and reduces the consumption of reagents during regeneration.

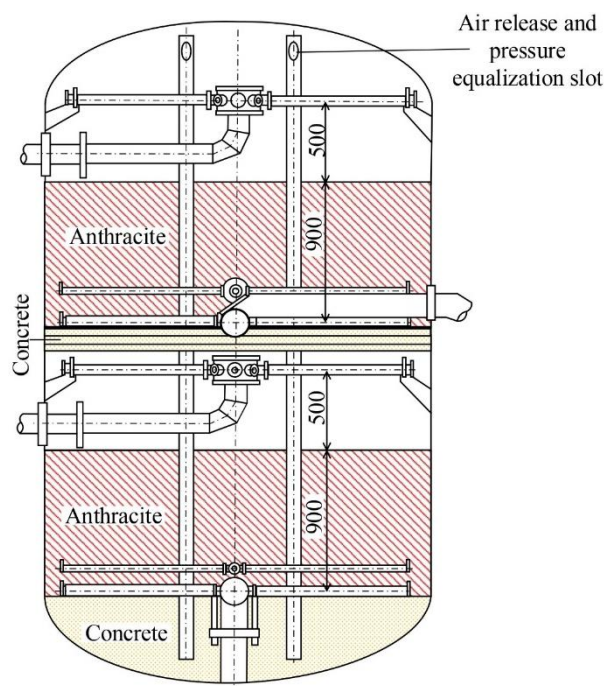


Figure 2. Diagram of the mechanical filter

Mechanical filtration is not capable of removing dissolved substances such as salts, metals, and organic compounds. For their removal, sodium cation exchange filters are used [15].

The design of the sodium cation exchange filters of stages I and II is identical [15]. Both filters operate on the same principle and have a similar structure. Possible differences may concern operational parameters, such as the volume of the filtering media or regeneration modes; however, these do not affect the basic structural scheme of the equipment (Figure 3).

The working bed of the filter consists of a layer of ion-exchange material, the height of which is determined by the design level Hsl – the maximum allowable bed level in operating condition (indicated in the diagram as the bottom level of the filter media layer). A free space is provided above the bed for regeneration. During backwashing, the layer expands, and this expansion must not exceed 30% of Hsl, as shown in the figure. This limitation prevents material loss and ensures uniform flow distribution. Maintaining these levels is crucial for the stable operation of the filter, the efficiency of ion-exchange processes, and the extended service life of the media [16].

Raw water is supplied to the filter under pressure and passes through the layer of cation exchange media from top to bottom, during which the water softening process occurs through ion exchange: calcium and magnesium ions are replaced by an equivalent amount of sodium ions.

The working cycle of the filter includes the following stages: softening, loosening, regeneration, and rinsing [16].

ASSESSMENT OF WATER TREATMENT QUALITY AT THE WATER TREATMENT COMPLEX OF TPP-1 IN THE CITY OF SEMEY

The softening cycle ends when the hardness of the water at the outlet exceeds 0.1 mg-eq/L, indicating that the ion-exchange capacity of the media has been exhausted and regeneration is required.

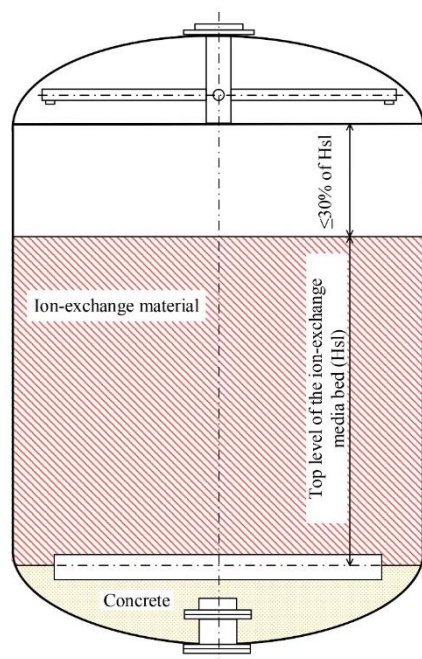


Figure 3. Diagram of the sodium cation exchange filter

Loosening, which lasts 15 to 30 minutes at an intensity of 3 to 4 L/m²·s, is carried out to eliminate compaction of the ion-exchange media and restore its filtration properties.

Regeneration is performed using a 5 to 8% sodium chloride (NaCl) solution to restore the exchange capacity

of the cation exchange resin by saturating it with sodium ions. After regeneration, the ion-exchange material is rinsed from top to bottom to remove excess regenerant solution and by-products formed during the recovery process [16].

Table 2 presents the water quality parameters before and after passing through the sodium cation exchange filters.

Table 2. Water quality parameters before and after sodium cation exchange filtration

Water Quality Parameters	Before treatment	After treatment
Total hardness, mg-eq/L	12	0.05
Calcium (Ca ²⁺), mg/L	40±100	≤ 1
Magnesium (Mg ²⁺), mg/L	10±30	≤ 0.5

The analysis results indicate the high efficiency of the sodium cation exchange filters used in the water treatment system. The total hardness of the raw water was 12 mg-eq/L, which classifies it as hard and potentially hazardous for the operation of thermal equipment due to the risk of scale formation. After passing through the filters, this parameter was reduced to 0.05 mg-eq/L, indicating the near-complete removal of calcium and magnesium ions.

Such a degree of water softening meets the requirements of ST RK 2248–2012 “Quality standards for feedwater and steam”, according to which the total hardness of feedwater must not exceed 0.1 mg-eq/L [17].

After passing through the sodium cation exchange filters, the softened water is directed to an atmospheric deaerator for the removal of dissolved gases, primarily oxygen and carbon dioxide. The schematic of the atmospheric deaerator is shown in Figure 4.

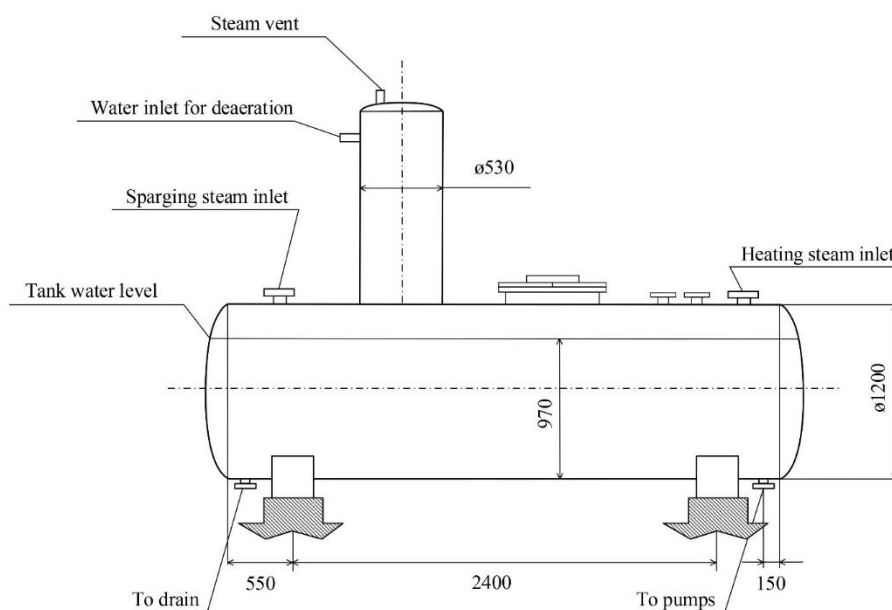


Figure 4. Diagram of the deaerator

ASSESSMENT OF WATER TREATMENT QUALITY AT THE WATER TREATMENT COMPLEX OF TPP-1 IN THE CITY OF SEMEY

The atmospheric deaerator ensures effective removal of dissolved gases from the softened water through direct contact with bubbling steam and subsequent heating [18–20].

The design includes a column with steam and water inlets, as well as a horizontal tank supplied with heating steam. The length of the tank body between the supports is 2400 mm, the distance from the left end to the axis of the drain nozzle (“To drain”) is 550 mm, and the distance from the right end to the axis of the nozzle supplying water to the pumps (“To pumps”) is 150 mm. This principle allows for a high degree of degassing without the use of vacuum. The steam-air mixture is discharged through a steam vent, preventing gas accumulation. The unit is equipped with drainage and pressure nozzles that ensure stable operation under varying hydraulic loads. Table 3 presents the water quality parameters at the inlet and outlet of the deaerator.

Table 3. Water quality parameters at the inlet and outlet of the deaerator

Water Quality Parameters	At the inlet of the deaerator	At the outlet of the deaerator
Dissolved oxygen, mg/L	6+10	≤ 0.05
Free CO ₂ , mg/L	5+10	–

Table 3 demonstrates a significant reduction in the concentration of dissolved oxygen after the water passes through the deaerator. This result complies with regulatory requirements and confirms the high efficiency of degassing achieved through the thermal effect of steam and intensive gas exchange. A decrease or complete removal of free CO₂ is also observed, which further reduces the corrosive activity of the water and enhances the reliability of feedwater pipelines and equipment.

CONCLUSION

The results of the study demonstrated the high efficiency of the operating water treatment system at TPP-1 in the city of Semey, which is based on a three-stage purification scheme including mechanical filtration, ion exchange, and thermal deaeration.

At the first stage – mechanical filtration with an anthracite media – up to 96–98% of suspended solids are removed. Water turbidity is reduced from the initial 45–65 NTU to 0.6 NTU, and the content of mechanical impurities decreases from 130–210 mg/L to less than 5 mg/L. These values are within the acceptable range for water treatment schemes of thermal power plants and ensure the effective operation of the subsequent purification stages.

At the second stage, water softening using first- and second-stage sodium cation exchange filters results in the near-complete removal of hardness. Total hardness is reduced from 12 mg-eq/L to 0.05 mg-eq/L; calcium concentration decreases from 40–100 mg/L to ≤ 1 mg/L, and magnesium from 10–30 mg/L to ≤ 0.5 mg/L. These values fully comply with regulatory standards for boiler

feedwater and effectively prevent scale formation in the water-steam circuit.

The final stage – thermal degassing in an atmospheric deaerator – ensures a reduction of dissolved oxygen concentration from 6–10 mg/L to ≤ 0.05 mg/L. Free CO₂ is also effectively removed, with its concentration decreasing from 5–10 mg/L to nearly zero, significantly reducing the corrosive activity of the water.

A comprehensive assessment of the effectiveness of all three stages confirmed that the water treatment system at TPP-1 consistently achieves the required parameters for turbidity, hardness, and dissolved gas content. According to [17] the limit values for these parameters are: total hardness ≤ 0.1 mg-eq/L, dissolved oxygen ≤ 0.05 mg/L, and free CO₂ is not allowed. The obtained results fully comply with these standards, which contributes to reliable and economical operation of boiler equipment, reduces the frequency of repairs, and extends inter-repair periods.

The data obtained may be used to optimize water-chemical regimes at similar thermal power facilities, as well as in the training of thermal power engineering students, helping to develop solid competencies in the operation of water treatment systems.

REFERENCES

- Chichirova N., Filimonova A., Vlasov S., Babikov O. Biological pollution of technological equipment and the chemically desalting water treatment plant at a TPP (review) // *Thermal Engineering*. – 2023. – Vol. 70, No. 9. – P. 665–672. <https://doi.org/10.1134/S0040601523090021>
- Romanova L.N. The current status of water treatment systems // *International Research Journal*. – 2023. – No. 2 (128). <https://doi.org/10.23670/IRJ.2023.128.49>
- Su Z., Ma H., Ding X. Research on key technologies for optimization of water systems and efficient utilization of regenerated water in thermal power plants // *Academic Journal of Science and Technology*. – 2024. – Vol. 9. – P. 111–116. <https://doi.org/10.54097/rva23p06>
- Stănculescu D., Zaharia C. Process water treatment in a thermal power plant: characteristics and its sediment/sludge disposal // *Environmental Engineering and Management Journal*. – 2020. – Vol. 19, No. 2. – P. 255–267. <https://doi.org/10.30638/eemj.2020.024>
- Galligan J. Advanced water treatment solutions for thermopower plants // *Fluence Technical Review*. – 2025. – URL: <https://www.fluencecorp.com/advanced-water-treatment-solutions-for-thermopower-plants/> (accessed: 25.06.2025).
- Fajri A. A., Rahmatullah T. A., Septano G. D., Nasaruddin. Analysis of Hardness Level in Enim River for Demineralization Water Process in Thermal Power Plant Tanjung Enim // *Jurnal Informasi dan Teknologi*. – 2025. – P. 67–75. <https://doi.org/10.60083/jidt.vi0.632>
- Zaharia C., Stănculescu D. Process water treatment in a thermal power plant: characteristics and sediment/sludge disposal // *Environmental Engineering and Management Journal*. – 2020. – Vol. 19, No. 2. – P. 255–267. <https://doi.org/10.30638/eemj.2020.024>

8. Tsubakizaki S., Wada T., Tokumoto T., Ichihara T., Kido H., Takahashi S. Water Quality Control Technology for Thermal Power Plants (Current Situation and Future Prospects) // Mitsubishi Heavy Industries Technical Review. – 2013. – Vol. 50, No. 3. – URL: <https://www.mhi.co.jp/technology/review/pdf/e503/e503022.pdf>
9. ST RK ISO 7027–2007. Water quality. Determination of turbidity. – Astana: Committee for Technical Regulation and Metrology, 2007. – 11 p.
10. ST RK 3865–2023. Industrial waters of thermal power plants. Determination of suspended solids by gravimetric method. – Astana: Committee for Technical Regulation and Metrology, 2023. – 9 p.
11. GOST 31954–2012. Drinking water. Methods for determination of hardness (ISO 6059:1984, NEQ; ISO 7980:1986, NEQ). – Moscow: Standartinform, 2018. – 20 p.
12. ST RK 2518–2014. Water quality. Methods for determination of dissolved oxygen. – Astana: Committee for Technical Regulation and Metrology, 2014. – 14 p.
13. GOST 23268.5–78. Water. Methods for determination of dissolved carbon dioxide. – Moscow: Standards Publishing, 1978. – 7 p.
14. Zhao Y., Wang R., Liu X., Ma H. Study on the performance of mechanical filtration for removal of suspended solids in industrial water treatment // Journal of Water Process Engineering. – 2022. – Vol. 45. – Art. 102483. <https://doi.org/10.1016/j.jwpe.2021.102483>
15. Brocx R., Kusic H., Spanjers H. Performance of strong acid cation-exchange filters in multi-stage water-treatment systems: removal of hardness and suspended solids // Journal of Water Process Engineering. – 2021. – Vol. 40. – Art. 102123. <https://doi.org/10.1016/j.jwpe.2021.102123>
16. Powell H., Smith J. Role of strong acid cation exchange in multi-stage water treatment at thermal power plants // Water Science & Technology. – 2022. – Vol. 86, No. 3. – P. 587–597. <https://doi.org/10.2166/wst.2022.123>
17. ST RK 2248–2012. Quality standards for feedwater and steam. – Astana: Committee for Technical Regulation and Metrology, 2012. – 28 p.
18. Chen C., Johnson P. Deaerators in industrial steam systems // U.S. Department of Energy. Improving Steam System Performance. – 2025. – (online publication). – URL: <https://www.energy.gov/eere/amo/articles/deaerators-industrial-steam-systems> (accessed: 10.07.2025).
19. Leduhovsky G.V. An analysis of carbonic acid removal in an atmospheric deaerator // Thermal Engineering. – 2020. – Vol. 67. – P. 320–323. <https://doi.org/10.1134/S004060152005002X> (accessed: 13.07.2025).
20. Sharapov V.I. The vapor of thermal deaerators as a factor of their energy efficiency // Power Technology and Engineering. – 2020. – Vol. 54. – P. 96–100. <https://doi.org/10.1007/s10749-020-01174-2>

СЕМЕЙ ҚАЛАСЫНДАҒЫ ЖЭО-1 СУ ДАЙЫНДАУ КЕШЕНІНДЕГІ СУ ТАЗАРТУ САПАСЫН БАҒАЛАУ

А. Р. Хажидинова¹, А. С. Хажидинов², С. Л. Елистратов³

¹ *Шәкәрім университеті, Семей, Қазақстан*

² *Ядролық медицина және онкология орталығы, Семей, Қазақстан*

³ *Новосибирск мемлекеттік техникалық университеті, Новосибирск, Ресей*

** Байланыс үшін E-mail: khazhidinova1991@mail.ru*

Жылу энергетикалық қондырғылардың сенімді әрі тиімді жұмысы сапалы су дайындаусыз мүмкін емес. Бұл, әсіресе, лайлылығы жоғары, ілінген бөлшектер мен еріген газдар көп табиғи су көздерін пайдаланатын нысандар үшін өзекті. Осы мақалада Семей қаласындағы ЖЭО-1-де қолданылатын үш сатылы су дайындау жүйесі қарастырылады. Зерттеудің мақсаты – суды тазартудың әр кезеңінің (механикалық сүзу, натрий-катиониттік жұмсарту және жылулық дегазация) тиімділігін бағалау. Зерттеу барысында тазарту сатыларының алдындағы және кейінгі су сапасы аспаптық әдіспен бағаланды, жабдықтарға визуалды тексеру жүргізілді, сондай-ақ пайдалану құжаттары талданды. Алынған нәтижелер тазартудың жоғары деңгейін көрсетті: антрацитті сүзгіштер лайлылықты 95%-дан астам төмендетеді, натрий-катионит сүзгілері қаттылықты 12 мг-экв/л-ден 0,05 мг-экв/л-ге дейін азайтады, ал деаэратор еріген оттегі концентрациясын $\leq 0,05$ мг/л-ге дейін төмендетеді. Технологиялық параметрлерді (сүзгі жүктемесі, регенерация режимі, шаю қарқындылығы) сақтау тазартудың тиімділігіне және жабдықтың ұзақ қызмет етуіне тікелей әсер ететіні көрсетілді. Зерттеу нәтижелері тазартылған судың бу қазандарының қоректік суына қойылатын нормативтік талаптарға сай келетінін көрсетті. Өлшеу нәтижелері негізінде су дайындау сызбасының әрбір тораптарының жұмысының тиімділігіне сандық бағалау жүргізілді. Бұл деректер ұқсас жылу энергетикалық нысандардағы су дайындау жүйелерін жобалау мен жаңғыртуда пайдаланылуы мүмкін және энергетикалық жабдықтар мен су-химиялық режимдерді пайдалануда инженерлік құзыреттіліктерді қалыптастыруда практикалық мәнге ие.

Түйін сөздер: *су дайындау, механикалық сүзгі, антрацит, натрий-катионитті сүзгі, деаэратор, су сапасы.*

ОЦЕНКА КАЧЕСТВА ОЧИСТКИ ВОДЫ В ВОДОПОДГОТОВИТЕЛЬНОМ КОМПЛЕКСЕ ТЭЦ-1
ГОРОДА СЕМЕЙ

А. Р. Хажидинова¹, А. С. Хажидинов², С. Л. Елистратов³

¹ *Шәкәрім университет, Семей, Қазақстан*

² *Центр ядерной медицины и онкологии, Семей, Қазақстан*

³ *Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия*

* E-mail для контактов: khazhidinova1991@mail.ru

Обеспечение надёжной и эффективной работы теплоэнергетических установок невозможно без организации качественной водоподготовки. Особенно это актуально для объектов, использующих в качестве источника воды природные водоёмы, характеризующиеся высокой мутностью, содержанием взвешенных частиц и растворённых газов. В настоящей работе рассматривается трёхступенчатая система водоподготовки, эксплуатируемая на теплоэлектроцентрали ТЭЦ-1 города Семей. Целью исследования явилась оценка эффективности работы каждого этапа водоочистки: механической фильтрации, натрий-катионитного умягчения и термической дегазации. В ходе исследования была проведена инструментальная оценка качества воды до и после каждой стадии очистки, а также визуальный осмотр оборудования и анализ эксплуатационной документации. Полученные данные свидетельствуют о высоком уровне очистки: механические фильтры с антрацитовой загрузкой позволяют снизить мутность воды более чем на 95%, натрий-катионитные фильтры уменьшают жёсткость с 12 мг-экв/л до 0,05 мг-экв/л, а деаэратор обеспечивает снижение концентрации растворённого кислорода до уровня $\leq 0,05$ мг/л. Показано, что соблюдение технологических параметров, таких как уровень загрузки, режим регенерации, интенсивность промывки, напрямую влияет на эффективность очистки и долговечность оборудования. Результаты работы подтверждают соответствие показателей очищенной воды нормативным требованиям, предъявляемым к питательной воде паровых котлов, и могут быть использованы при проектировании и модернизации систем водоподготовки на аналогичных теплоэнергетических объектах. На основании результатов измерений производилась количественная оценка эффективности работы каждого узла водоподготовительной схемы. Также полученные данные представляют практическую ценность для формирования устойчивых инженерных компетенций в области эксплуатации энергетического оборудования и водно-химических режимов.

Ключевые слова: водоподготовка, механический фильтр, антрацит, натрий-катионитный фильтр, деаэратор, качество воды.

<https://doi.org/10.52676/1729-7885-2025-4-107-112>

УДК: 574:504.3:621.311.25:621.039.58

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА ДОЗОВОЙ НАГРУЗКИ НА НАСЕЛЕНИЕ ОТ АТМОСФЕРНЫХ ВЫБРОСОВ ПРИ НОРМАЛЬНЫХ УСЛОВИЯХ РАБОТЫ АЭС

С. П. Левченко*, В. В. Божко, П. Е. Кривицкий

Филиал «Институт радиационной безопасности и экологии» РГП НЯЦ РК, Курчатов, Казахстан

* E-mail для контактов: levchenko_sveta@nnc.kz

В настоящей работе представлены результаты теоретической оценки дозовой нагрузки на население от атмосферных выбросов АЭС в течение первого года работы и через 30 лет эксплуатации в нормальных условиях. Дозовые нагрузки оценены с учетом следующих путей облучения организма человека: внутреннее облучение за счет ингаляционного поступления радионуклидов, внешнее облучение от облака, внешнее облучение за счет загрязнения местности и внутреннее облучение за счет потребления продуктов питания. Расчетным путем установлено, что при эксплуатации АЭС в нормальных условиях не будут превышены квоты на допустимую дозовую нагрузку на население (10 мкЗв/год), формируемую за счет выбросов радиоактивных газов и аэрозолей в атмосферу. Основной вклад в суммарную дозовую нагрузку на население вносит внешнее фотонное облучение от радиоактивного облака. Суммарная доза по всем путям облучения, формируемая в результате атмосферных выбросов, увеличивается с течением времени за счет накопления долгоживущих радионуклидов в объектах окружающей среды, в связи с чем через 30 лет работы АЭС в нормальных условиях суммарная доза радионуклидов ^{60}Co и ^{90}Sr увеличится на один математический порядок.

Ключевые слова: атомная электростанция (АЭС), радионуклиды, выбросы в атмосферу, дозовая нагрузка, население, окружающая среда, облучение.

ВВЕДЕНИЕ

Атомная энергетика является одним из основных мировых источников энергии. В целом, в мире прослеживается позитивный тренд развития атомной энергетике. Данная тенденция обусловлена прогнозируемым мировым энергетическим кризисом и глобальной задачей по переходу к углеродной нейтральности [1].

Строительство атомной электростанции (АЭС) в Казахстане еще с 90-х годов рассматривается как важный экономический проект для обеспечения энергетической самодостаточности региона. С обретением независимости, строительство АЭС стало особенно необходимым в контексте энергетического суверенитета и безопасности страны, как ключевой составляющей общей национальной безопасности Казахстана, залогом будущего уверенного развития государства. Строительство АЭС в Казахстане создаст прочную основу для энергетической безопасности страны, улучшит экологическую ситуацию за счет сокращения выбросов, стабилизирует цены на электроэнергию и станет важным шагом на пути к технологическому развитию и промышленному росту [2]. Решение по строительству первой АЭС в Казахстане принято по результатам общенационального референдума, местом под строительство выбран Жамбылский район Алматинской области [3].

Оценка фактического и потенциального радиационного воздействия АЭС на природные компоненты (почвенный покров, водные объекты, атмосферный воздух, растительный и животный мир) окружающей среды и население представляют собой важный аспект в обеспечении безопасности и устойчивого раз-

вития ядерной энергетики. Работа любой АЭС обязательно сопряжена с выбросами в окружающую среду определенного количества радиоактивных элементов. Количественный состав газо-аэрозольных выбросов зависит от типа реактора, который составляет основу станции [4].

Оценка дозовых нагрузок на человека в районе расположения АЭС является неотъемлемым элементом радиоэкологического обоснования строительства и ввода атомной станции в эксплуатацию. Кроме того, необходим долговременный прогноз изменения дозовой нагрузки на население для планируемого периода функционирования АЭС [5]. С учетом наличия водных и энергетических ресурсов, низкой сейсмической активностью, развитой научной базой и опытом работы с радиоактивными материалами, еще одной из перспективных площадок для строительства второй АЭС в Казахстане – район вблизи города Курчатов (область Абай), расположенного на левом берегу реки Иртыш.

Цель работы: прогнозная оценка доз облучения населения в результате выбросов АЭС в течение первого года работы и через 30 лет эксплуатации электростанции, а также анализ и сопоставление полученных результатов с действующими нормативами Республики Казахстан.

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Объект исследования. В качестве объекта исследования выбрана проектируемая АЭС, которая будет включать в себя два энергоблока с водо-водяными реакторами поколения III и III+, имеющими высокий уровень безопасности и улучшенные экономические показатели [6].

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА ДОЗОВОЙ НАГРУЗКИ НА НАСЕЛЕНИЕ ОТ АТМОСФЕРНЫХ ВЫБРОСОВ ПРИ НОРМАЛЬНЫХ УСЛОВИЯХ РАБОТЫ АЭС

Методы исследования. К настоящему времени разработано достаточное количество программных средств, предназначенных для прогнозирования радиационного воздействия на население в условиях нормальной эксплуатации АЭС. Такие программы позволяют оценить возможные риски для здоровья человека и состояния окружающей среды, а также дать долгосрочную оценку дозовых нагрузок на население, находящегося в «зоне воздействия» функционирующей в штатном режиме работы АЭС.

Оптимальным (с точки зрения моделирования процессов, параметрического обеспечения, доступности и «дружелюбности» интерфейса) программным средством для прогнозирования последствий хронических радиоактивных выбросов для населения является пакет CROM, разработанный на основе миграционных моделей МАГАТЭ. Этот пакет позволяет прогнозировать поведение радионуклидов в атмосфере и природных средах, оценивать плотности загрязнения, накопление радиоактивных веществ в компонентах экосистем и сельскохозяйственной продукции. Программный пакет CROM характеризуется оптимальным уровнем сложности (для решения поставленной задачи) и хорошо проработанным параметрическим обеспечением. Этот пакет создан с учетом информации, представленной в документе МАГАТЭ SRS №19 с некоторыми улучшениями на основе EUR 15760 [7].

В настоящей работе дана прогнозная оценка доз облучения населения в результате штатных выбросов АЭС в течение первого года работы и через 30 лет ее эксплуатации. Дозовые нагрузки оценивались по различным путям облучения для возрастной группы населения «старше 17 лет», проживающей на расстоянии 30 км от предполагаемого места строительства АЭС. Расчет доз облучения населения выполнен с помощью программного пакета CROM. Для обеспечения максимальной оценки доз, значения входных параметров, используемые в расчете, были заданы с применением консервативного подхода. В качестве исходных данных использованы характеристики расчетных выбросов радиоактивных газов и аэрозолей в атмосферу Ленинградской АЭС-2 в нормальных условиях эксплуатации (таблица 1).

В расчет включены следующие пути облучения организма человека: внутреннее облучение за счет ингаляционного поступления радионуклидов, внешнее облучение от облака, внешнее облучение за счет загрязнения местности и внутреннее облучение за счет потребления продуктов питания. Оценка доз облучения выполнена с учетом рациона питания населения, проживающего на расстоянии 30 км от предполагаемого места строительства АЭС. В рационе были учтены наиболее распространенные в данном регионе продукты питания: мясо-молочная (мясо овец (баранина), говядина и коровье молоко) и растениеводческая продукция (зерновые культуры, овощи и фрукты), а также речная рыба. Годовое потребление

продуктов питания для взрослого населения в области Абай (за 2024 год) представлено в таблице 2.

Таблица 1. Годовой выброс радиоактивных газов и аэрозолей со станции при работе блока в нормальном режиме, ГБк/год×блок [8]

Радионуклид	Место регистрации характеристик выброса	
	Вентиляционная труба	Выше кровли, здание турбины
³ H	5,1·10 ³	2,9·10 ⁰
¹⁴ C	3,0·10 ²	—
^{83m} Kr	6,0·10 ²	1,3·10 ¹
^{85m} Kr	2,2·10 ³	3,2·10 ¹
⁸⁵ Kr	3,1·10 ²	5,4·10 ⁻²
⁸⁷ Kr	1,2·10 ³	3,3·10 ¹
⁸⁸ Kr	4,8·10 ³	8,5·10 ¹
^{131m} Xe	2,0·10 ²	1,0·10 ⁰
¹³³ Xe	2,8·10 ⁴	2,6·10 ²
¹³⁵ Xe	6,7·10 ³	7,8·10 ¹
¹³⁸ Xe	1,9·10 ²	1,7·10 ¹
¹³¹ I	8,3·10 ⁻²	1,4·10 ⁻³
¹³² I	1,1·10 ⁻¹	2,3·10 ⁻³
¹³³ I	1,5·10 ⁻¹	3,6·10 ⁻³
¹³⁴ I	7,2·10 ⁻²	1,4·10 ⁻³
¹³⁵ I	1,2·10 ⁻¹	2,9·10 ⁻³
⁵¹ Cr	8,5·10 ⁻⁵	2,0·10 ⁻⁶
⁵⁴ Mn	5,3·10 ⁻⁶	1,2·10 ⁻⁷
⁶⁰ Co	3,4·10 ⁻⁵	7,8·10 ⁻⁷
⁸⁹ Sr	3,5·10 ⁻⁴	5,0·10 ⁻⁶
⁹⁰ Sr	6,5·10 ⁻⁷	1,3·10 ⁻⁸
¹³⁴ Cs	2,2·10 ⁻²	4,5·10 ⁻⁴
¹³⁷ Cs	3,3·10 ⁻²	6,8·10 ⁻⁴
ИРГ	4,4·10 ⁴	5,2·10 ²
Йоды	5,3·10 ⁻¹	1,2·10 ⁻²
Аэрозоли	5,5·10 ⁻²	1,1·10 ⁻³
Сумма (за исключением трития)	4,4·10 ⁴	5,2·10 ²

Таблица 2. Потребление основных продуктов питания [9]

Категория продуктов	Потребление, кг/год
Хлебопродукты и крупяные изделия	123,2
Мясо и мясопродукты	72,4
Рыба и морепродукты	12,6
Молоко и молочные продукты	244,3
Фрукты	55,9
Овощи	58,0
Картофель	30,6

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

С помощью программного средства CROM выполнена оценка доз облучения населения, проживающего на расстоянии 30 км от предполагаемого места строительства АЭС. Рассчитаны суммарные дозовые нагрузки для возрастной группы «старше 17 лет», формируемые по различным путям облучения за год и за 30 лет ее эксплуатации. Результаты расчета представлены на рисунке 1.

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА ДОЗОВОЙ НАГРУЗКИ НА НАСЕЛЕНИЕ ОТ АТМОСФЕРНЫХ ВЫБРОСОВ ПРИ НОРМАЛЬНЫХ УСЛОВИЯХ РАБОТЫ АЭС

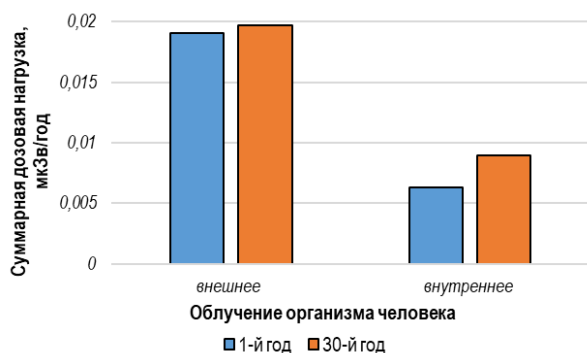


Рисунок 1. Суммарные дозовые нагрузки на население

Согласно результатам расчета (рисунок 1), полученные суммарные дозовые нагрузки не превышают предела дозы техногенного облучения населения (1 мЗв/год), установленного в Гигиенических нормативах для населения, подвергающегося облучения от радиационных объектов [10].

Кроме того, в Санитарных правилах установлены квоты на величину допустимой индивидуальной эффективной дозы облучения от всех радиационных факторов (воздушных выбросов, водных сбросов) для населения, проживающего за пределами санитарно-защитной зоны радиационного объекта при его нормальной эксплуатации [11]. Полученные значения не превысили минимального значения квоты (10 мкЗв/год), установленного в Санитарных правилах для населения, проживающего в зоне наблюдения радиационного объекта [11].

Суммарная доза по всем путям облучения, формируемая каждым радионуклидом в результате атмосферных выбросов в течение 1-го и 30-го года работы

АЭС при нормальных условиях представлена на рисунке 2.

Из рисунка 2 видно, что с течением времени происходит накопление долгоживущих радионуклидов в объектах окружающей среды, в связи с чем через 30 лет работы АЭС в нормальных условиях суммарная доза радионуклидов ^{60}Co и ^{90}Sr увеличивается на один математический порядок.

Вклад различных путей облучения населения в суммарную дозовую нагрузку в результате выбросов АЭС в атмосферу в течение 1-го и 30-го года работы при нормальных условиях показан на рисунке 3.

Расчетным путем установлен основной путь облучения населения – внешнее фотонное облучение от радиоактивного облака (рисунок 3). За 30 лет эксплуатации АЭС в нормальном режиме вклад облучения от радиоактивного облака в суммарную дозу облучения снизится с 75,2% до 66,7%. Это связано с увеличением внешнего облучения от поверхности почвы (с 0,4% до 2,4%) и внутреннего облучения при пероральном пути поступления (с 24,2% до 30,8%) в организм человека, за счет накопления долгоживущих радионуклидов, находящихся в объектах окружающей среды.

Отдельные радионуклиды вносят различный вклад в формирование дозовой нагрузки по различным путям облучения организма человека (рисунок 4). Это обусловлено особенностью характеристик каждого радиоактивного изотопа, входящего в состав атмосферных выбросов АЭС, а также различием физико-химических свойств данных элементов, которые влияют на их миграционные способности в объектах окружающей среды.

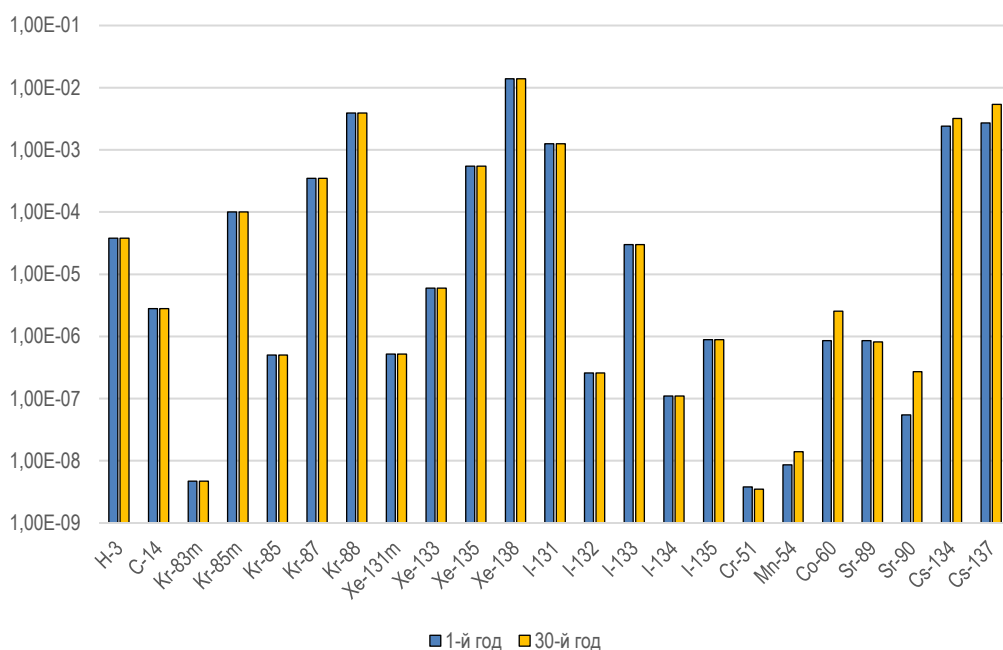


Рисунок 2. Суммарная доза по всем путям облучения, мкЗв/год

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА ДОЗОВОЙ НАГРУЗКИ НА НАСЕЛЕНИЕ ОТ АТМОСФЕРНЫХ ВЫБРОСОВ ПРИ НОРМАЛЬНЫХ УСЛОВИЯХ РАБОТЫ АЭС

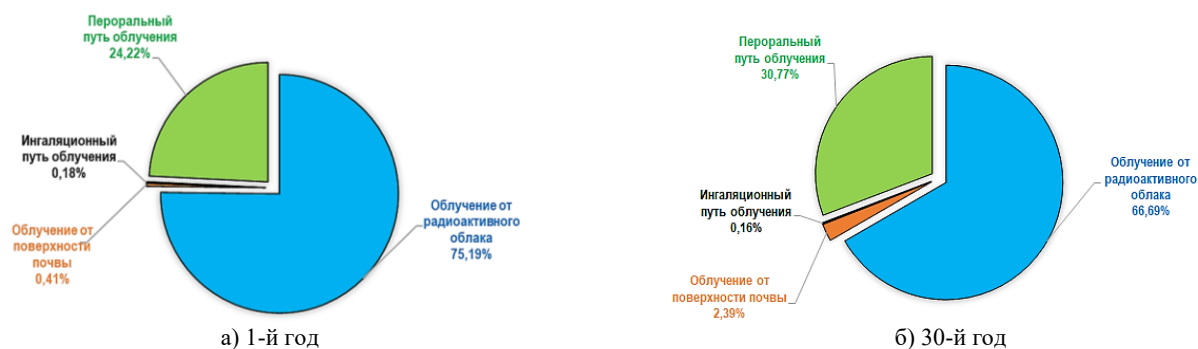


Рисунок 3. Вклад различных путей облучения в суммарную дозовую нагрузку населения

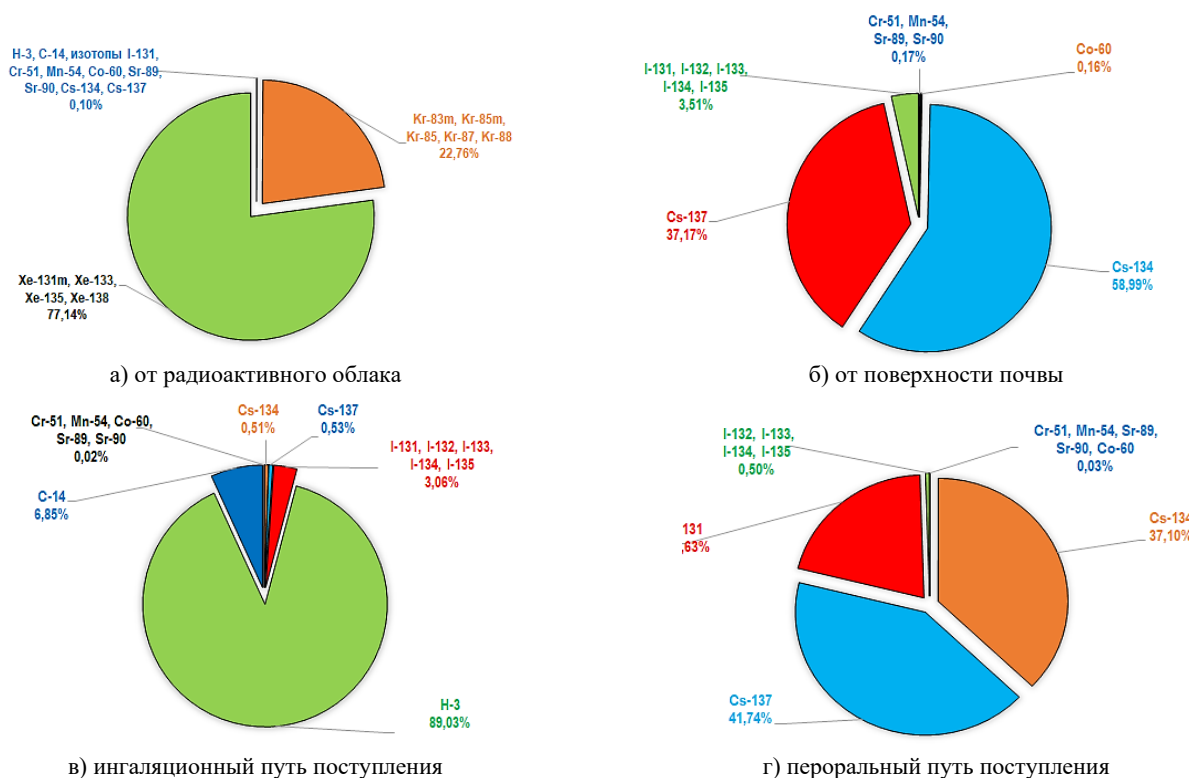


Рисунок 4. Вклад различных радионуклидов в формирование дозовых нагрузок на население

Как видно из рисунка 4 а, инертные радиоактивные газы вносят существенный вклад в суммарную дозовую нагрузку только по пути облучения от радиоактивного облака. Вклад ^3H значительно преобладает при облучении, обусловленном поступлением радионуклидов в организм человека за счет дыхания (рисунок 4 в). При облучении от поверхности почвы наибольший вклад вносят радионуклиды ^{134}Cs и ^{137}Cs (рисунок 4 б), а при потреблении продуктов питания – ^{134}Cs , ^{137}Cs и ^{131}I (рисунок 4 г).

На формирование суммарной дозы внутреннего облучения существенное влияние оказывает рацион питания населения (рисунок 5).

Согласно полученным данным (рисунок 5), в суммарную дозу внутреннего облучения за счет перорального поступления наибольший вклад дает потребление мясомолочных продуктов, меньше – потребление рыбы, злаков, овощей и фруктов.

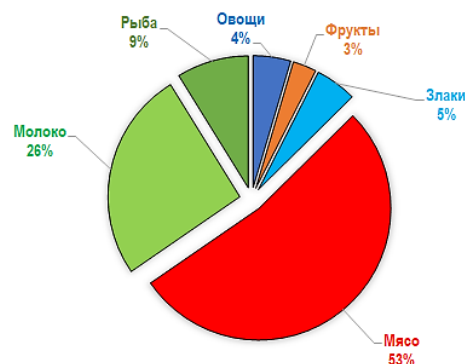


Рисунок 5. Вклад пищевого рациона в формирование дозы внутреннего облучения

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

По результатам теоретической оценки дозовой нагрузки на население можно сделать следующие выводы:

1. При эксплуатации АЭС в нормальных условиях не будут превышены квоты на допустимую дозовую нагрузку на население (10 мкЗв/год), формируемую за счет выбросов радиоактивных газов и аэрозолей в атмосферу.

2. Расчетная суммарная доза облучения населения от атмосферных выбросов при нормальных условиях работы АЭС значительно меньше допустимой дозовой нагрузки, как в первый год работы электростанции (0,025 мкЗв/год), так и за 30 лет (0,029 мкЗв/год). Значительного увеличения суммарной дозовой нагрузки на население с течением времени за счет накопления долгоживущих радионуклидов в объектах окружающей среды не происходит.

3. Основной вклад в суммарную дозовую нагрузку на население вносит внешнее фотонное облучение от радиоактивного облака.

4. В зависимости от пути облучения организма человека основными дозообразующими радионуклидами являются: ^{138}Xe – при облучении от радиоактивного облака; ^3H – за счет дыхания (ингаляционный путь); ^{134}Cs и ^{137}Cs – в случае облучения от поверхности почвы; ^{134}Cs , ^{137}Cs и ^{131}I – при потреблении продуктов питания (пероральный путь).

5. В суммарную дозу внутреннего облучения за счет перорального поступления наибольший вклад дает потребление мясо-молочных продуктов, меньше – потребление рыбы, злаков, овощей и фруктов.

6. Адекватная оценка суммарных доз облучения населения возможна только в том случае, если в качестве исходных данных использованы все основные дозообразующие радионуклиды. Различие в теоретических и реальных данных по составу атмосферных выбросов при эксплуатации АЭС в нормальных условиях, может оказать существенное влияние на результаты прогнозных оценок.

Данная работа выполнена в рамках финансирования Агентства Республики Казахстан по атомной энергии по научно-технической программе BR24792713 «Развитие атомной энергетики в Республике Казахстан».

ЛИТЕРАТУРА

1. Концепции развития топливно-энергетического комплекса Республики Казахстан на 2023–2029 годы. Постановление Правительства Республики Казахстан от 28 июня 2014 года № 724.
2. Часто задаваемые вопросы про АЭС / <https://www.gov.kz/situations/723/1481?lang=ru>
3. Постановление правительства Республики Казахстан «О районе строительства ядерной установки «Атомная электрическая станция»» от 30 декабря 2024 года № 1137.

4. Стожаров, А. Н. Радиационно-гигиеническая оценка нормированных выбросов в атмосферу атомными электростанциями с водо-водяными энергетическими реакторами // Медицинский журнал. – 2017. – № 1. – С. 119–123.
5. Карпенко Е.И., Спиридонов С.И., Куртмулаева В.Э. Долгосрочный прогноз дозовых нагрузок на население при штатных атмосферных выбросах Ленинградской АЭС-2 с помощью программного средства CROM // Радиация и риск (Бюллетень Национального радиационно-эпидемиологического регистра). – 2018. – Т. 27. – № 2. – С. 20–27.
6. Новости Казахстана и мира на сегодня / <https://www.zakon.kz/stati/6448186-glavnye-voprosy-ob-aes-v-kazakhstane-kto-kak-i-v-kakie-sroki-mozhet-ee-postroit.html>
7. М. К. Мукушева, С. И. Спиридонов, Р. А. Микаилова, А. В. Топорова. Сравнительный анализ программных средств для прогнозирования радиологических последствий штатных и аварийных выбросов АЭС для населения // Вестник НЯЦ РК. – 2024. Выпуск 1. – С. 89–95. <https://doi.org/10.52676/1729-7885-2024-1-89-95>
8. Ленинградская АЭС-2 энергоблоки № 1 и № 2. Материалы обоснования лицензии на эксплуатацию энергоблока № 2 Ленинградской АЭС-2. Книга 1 // ОАО «Концерн Росэнергоатом», 2015, 155 стр. – С. 23.
9. Статистика уровня жизни. Потребление продуктов питания в домашних хозяйствах Республики Казахстан / <https://stat.gov.kz>
10. «Гигиенические нормативы к обеспечению радиационной безопасности» (утверждены приказом Министра здравоохранения Республики Казахстан от 2 августа 2022 года № КР ДСМ-71).
11. Санитарные правила «Санитарно-эпидемиологические требования к обеспечению радиационной безопасности» (утверждены приказом Министра здравоохранения Республики Казахстан от 15 декабря 2020 года № КР ДСМ-275/2020, с изменениями и дополнениями по состоянию на 22.04.2023 г.).

REFERENCES

1. Kontseptsii razvitiya toplivno-energeticheskogo kompleksa Respubliki Kazakhstan na 2023–2029 gody. Postanovlenie Pravitel'stva Respubliki Kazakhstan ot 28 iyunya 2014 goda No. 724.
2. Chasto zadavaemye voprosy pro AES / <https://www.gov.kz/situations/723/1481?lang=ru>
3. Postanovlenie pravitel'stva Respubliki Kazakhstan “O rayone stroitel'stva yadernoy ustanovki ‘Atomnaya elektricheskaya stantsiya’” ot 30 dekabrya 2024 goda No. 1137.
4. Stozharov, A. N. Radiatsionno-gigienicheskaya otsenka normirovannykh vybrosov v atmosferu atomnymi elektrostantsiyami s vodo-vodyanymi energeticheskimi reaktorami // Meditsinskiy zhurnal. – 2017. – No. 1. – P. 119–123.
5. Karpenko E.I., Spiridonov S.I., Kurtmulaeva V.E. Dolgosrochnyy prognoz dozovykh nagruzok na naselenie pri shtatnykh atmosferynykh vybrosoch Leningradskoy AES-2 s pomoshch'yu programmnoy sredstva CROM // Radiatsiya i risk (Byulleten' Natsional'nogo radiatsionno-epidemiologicheskogo registra). – 2018. – Vol. 27. – No. 2. – P. 20–27.

6. Novosti Kazakhstana i mira na segodnya / <https://www.zakon.kz/stati/6448186-glavnye-voprosy-ob-aes-v-kazakhstane-kto-kak-i-v-kakie-sroki-mozhet-ee-postroit.html>
7. Mukusheva M.K., Spiridonov S.I., Mikailova R.A., Toporova A.V. Comparative analysis of software tools to predict the radioecological consequences after routine and accidental emissions by NPP for the population // NNC RK Bulletin. – 2024. Issue 1. – P. 89–95. (In Russ.) <https://doi.org/10.52676/1729-7885-2024-1-89-95>
8. Leningradskaya AES-2 energobloki No. 1 i No. 2. Materialy obosnovaniya litsenzii na ekspluatatsiyu energobloka No. 2 Leningradskoy AES-2. Kniga 1// OAO “Kontsern Rosenergoatom”. – 2015. – P. 23.
9. Statistika urovnya zhizni. Potrebleniye produktov pitaniya v domashnikh khozyaystvakh Respubliki Kazakhstan / <https://stat.gov.kz>
10. “Gigienicheskie normativy k obespecheniyu radiatsionnoy bezopasnosti” (utverzhdeny prikazom Ministra zdavookhraneniya Respubliki Kazakhstan ot 2 avgusta 2022 goda No. QR DSM-71).
11. Sanitarnye pravila “Sanitarno-epidemiologicheskoe trebovaniye k obespecheniyu radiatsionnoy bezopasnosti” (utverzhdeny prikazom Ministra zdavookhraneniya Respubliki Kazakhstan ot 15 dekabrya 2020 goda No. QR DSM-275/2020, s izmeneniyami i dopolneniyami po sostoyaniyu na 22.04.2023 g.).

АЭС ҚАЛЫПТЫ ЖҰМЫС ІСТЕУІ КЕЗІНДЕ АТМОСФЕРАЛЫҚ ШЫҒАРЫНДЫЛАРДАН ХАЛЫҚҚА ТҮСЕТІН ДОЗАЛЫҚ ЖҮКТЕМЕНІ ТЕОРИЯЛЫҚ БАҒАЛАУ

С. П. Левченко^{*}, В. В. Божко, П. Е. Кривицкий

ҚР ҰЯО РМК «Радиациялық қауіпсіздік және экология институты» филиалы, Курчатов, Қазақстан

** Байланыс үшін E-mail: levchenko_sveta@nnc.kz*

Бұл жұмыста АЭС жұмысының бірінші жылында және қалыпты жағдайда 30 жыл пайдаланылғаннан кейін атмосфералық шығарындыларынан халыққа түсетін дозалық жүктемені теориялық бағалау нәтижелері ұсынылған. Дозалық жүктемелер адам ағзасының келесі сәулелену жолдарын ескере отырып бағаланады: радионуклидтердің ингаляциялық түсуінен ішкі сәулелену, бұлттан сыртқы сәулелену, жергілікті жердің ластануынан сыртқы сәулелену және азық-түлікті тұтынудан ішкі сәулелену. АЭС-ті қалыпты жағдайда пайдалану кезінде атмосфераға радиоактивті газдар мен аэрозольдардың шығарылуынан қалыптасатын халыққа рұқсат етілген дозалық жүктеме (10 мкЗв/жыл) квотасынан аспайтыны есептеу арқылы анықталды. Халыққа түсетін жиынтық дозалық жүктемеге негізгі үлесті радиоактивті бұлттан сыртқы фотондық сәулелену қосады. Атмосфералық шығарындылар нәтижесінде қалыптасатын барлық сәулелену жолдары бойынша жиынтық доза қоршаған орта объектілерінде ұзақ өмір сүретін радионуклидтердің жинақталуы есебінен уақыт өткен сайын ұлғаяды, осыған байланысты АЭС қалыпты жағдайда 30 жыл жұмыс істегеннен кейін ⁶⁰Co және ⁹⁰Sr радионуклидтерінің жиынтық дозасы бір математикалық мәртеге ұлғаяды.

Түйін сөздер: атом электр станциясы (АЭС), радионуклидтер, атмосфераға шығарындылар, дозалық жүктеме, халық, қоршаған орта, сәулелену.

THEORETICAL ASSESSMENT OF PUBLIC RADIATION BURDEN BY ATMOSPHERIC EMISSIONS UNDER NORMAL NPP OPERATING CONDITIONS

С. П. Левченко^{*}, В. В. Божко, П. Е. Кривицкий

Branch “Institute of Radiation Safety and Ecology” RSE NNC RK, Kurchatov, Kazakhstan

E-mail for contacts: levchenko_sveta@nnc.kz

This paper presents the results of a theoretical assessment of public radiation burden by atmospheric emissions from NPP during the first year of operation and after 30 years of operation under normal conditions. Radiation burdens were estimated given the following exposure pathways of the human body: internal exposure through inhalation of radionuclides, external exposure to a cloud, external exposure to ground contamination and internal exposure to the intake of foodstuffs. It was found by calculation that when a NPP is operated under normal conditions, quotas for the permissible public radiation burden (10 μ Sv/year) generated by emissions of radioactive gases and aerosols into the atmosphere will not be exceeded. The main contribution to the total public radiation burden is made by external photon exposure to a radioactive cloud. The total dose through all exposure pathways resulting from atmospheric emissions increases over time due to the accumulation of long-lived radionuclides in environmental compartments, for which reason, after 30 years of NPP operation under normal conditions, the total dose of ⁶⁰Co and ⁹⁰Sr will increase by one mathematical order of magnitude.

Keywords: nuclear power plant (NPP), radionuclides, atmospheric emissions, radiation burden, population, environment, exposure.

<https://doi.org/10.52676/1729-7885-2025-4-113-118>

УДК 537.533.7

INVESTIGATION OF STRUCTURE AND PROPERTIES OF COATINGS OBTAINED BY ELECTRIC ARC METALLIZATION AT DIFFERENT WIRE FEED RATES

B. K. Rakhadilov^{1,2}, D. B. Buitkenov³, A. K. Apsezhanova^{1*}, N. M. Magazov¹, Ye. S. Molbossynov¹

¹ D. Serikbayev East Kazakhstan Technical University, Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan

² "PlasmaScience" LLP, Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan

³ S. Amanzholov East Kazakhstan University, Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan

* E-mail for contacts: akbotaapsezhanova@mail.com

This study investigates the effect of wire feed rate on the structure and properties of coatings produced by electric arc metallization using 30KhGSA wire. The coatings were deposited onto 65G steel substrates at feed rates of 5, 7, and 9 cm/s using supersonic arc spraying. A comprehensive characterization was performed, including microstructural analysis, EDS mapping, X-ray diffraction, and evaluation of coating thickness, hardness, and porosity. The results indicate that an increase in wire feed rate leads to greater coating thickness but reduces structural homogeneity. At 5 cm/s, the coating exhibited a uniform microstructure and low porosity, though with limited thickness. The intermediate feed rate of 7 cm/s provided optimal properties, including balanced thickness (up to 220 μm), reduced porosity (4.3%), and high hardness (up to 720 HV). At 9 cm/s, further thickness growth was accompanied by turbulent deposition, resulting in increased porosity and structural defects. These results confirm that wire feed rate is a decisive factor in coating quality, and its optimization is essential for achieving durable and reliable protective layers.

Keywords: porosity, electric arc metallization, coating, steel, structure, steel wire.

INTRODUCTION

The development of materials with improved properties (wear resistance, oxidation resistance, thermal stability) for parts operating under intensive loads is a topical issue in modern materials science. Accelerated wear and degradation of material properties significantly reduce the service life of critical components. As an alternative to costly fully alloyed steels, it is often more practical to use low-alloy steels in combination with protective coatings [1]. Steel 65G, while strong and widely used, exhibits limited oxidation resistance and is therefore in need of protective enhancement. One promising solution is to apply coatings from wear- and corrosion-resistant steels such as 30KhGSA to increase the durability and performance of 65G-based parts [2–5]. Electric arc metallization (EAM) is an efficient and cost-effective method of applying such coatings. It enables the formation of dense layers with good adhesion by melting wire feedstock with an electric arc and propelling the molten droplets onto the surface using compressed air. The quality of the resulting coating is significantly affected by parameters such as arc voltage, current, and wire feed rate. Compared to other coating deposition methods such as HVOF (High-Velocity Oxy-Fuel) and plasma spraying, electric arc metallization offers several advantages, including lower equipment cost, operational simplicity, and the ability to coat large components without complex surface preparation. While HVOF and plasma-sprayed coatings generally provide higher density and better structural homogeneity, EAM remains a practical and cost-effective method, especially for industrial and agricultural equipment subject to abrasive wear. Thus, the use of EAM is justified where economic feasibility and sufficient wear resistance are prioritized.

This study focuses on the influence of wire feed rate (5–9 cm/s) on the structure and performance of 30KhGSA coatings applied to a 65G steel substrate under fixed current and air pressure. The investigated parameters include porosity, microhardness, surface roughness, and friction coefficient.

The scientific novelty of this work lies in the comprehensive analysis of the effect of wire feed rate on coatings obtained by electric arc metallization using 30KhGSA wire, which has not been previously studied in detail. The study employs a supersonic arc spraying technique to form high-performance coatings and explores a wide range of characteristics, including microstructure, adhesion, and tribological behavior. Notably, it was found that a medium wire feed rate of 7 cm/s provides an optimal balance between structural integrity and functional properties, challenging the common assumption that higher feed rates yield better results. These conclusions are supported by SEM, EDS, and XRD analysis, offering practical insights for improving the wear resistance of machine parts operating under abrasive conditions [6].

The aim of this study is to evaluate the effect of wire feed rate on the morphology and performance characteristics of coatings. Since the 30KhGSA/65G steel combination has not been sufficiently studied in the context of arc metallization, this research addresses a relevant gap in both scientific and industrial contexts, especially for applications involving intensive abrasive wear.

MATERIALS AND METHODS OF RESEARCH.

The substrate material used was 65G steel, a high-carbon, low-alloy steel with approximately 0.65% carbon content. The substrates were cut into rectangular plates measuring 25×25×10 mm. Prior to coating, the surface of the samples was carefully prepared. Initially, they were

INVESTIGATION OF STRUCTURE AND PROPERTIES OF COATINGS OBTAINED BY ELECTRIC ARC METALLIZATION AT DIFFERENT WIRE FEED RATES

sanded with progressively finer sandpaper, starting from 100 grit and moving to 360 grit, which ensured the necessary smoothness while removing oxide layers and contaminants. Following this, sandblasting was carried out using an electrocorundum abrasive on a Nordberg NS3 machine to achieve the desired surface roughness, enhancing the coating's adhesion.

Table 1. Composition of chemical elements of steel (by mass, %)

C	Si	Mn	Ni	S	P	Cr	Cu
0.62–0.7	0.17–0.37	0.9–1.2	to 0.25	to 0.035	to 0.035	to 0.25	to 0.2

For the experiments, steel wire of 30KhGSA grade (AISI 1330 equivalent), with a diameter of 1.4 mm and manufactured in compliance with GOST 10543-98 standards, was used as electrodes. The chemical composition of 30KhGSA steel is presented in Table 2.

Table 2. Chemical composition of steel 30KhGSA (by mass, %)

C	Si	Mn	Ni	S	P	Cr	Cu
0.28–0.34	0.9–1.2	0.8–1.1	to 0.3	to 0.025	to 0.025	0.8–1.1	to 0.3

Coating was carried out using the SX-600 supersonic arc metallizer (Guangzhou, China), a sophisticated system that includes a power supply, arc spray gun, control unit, and compressed air supply module. The process involves melting metal wires with an electric arc, after which the molten metal is atomized by a stream of compressed air [7]. The molten particles then deposit onto the target surface, forming a continuous coating. The thickness of the applied layer is controlled by adjusting the number of passes of the metallizer and its movement speed relative to the surface. The device features guides that ensure a continuous feed of two metal wires, with an electric arc generated between their ends. Compressed air, reaching speeds exceeding 100 m/s, is directed through a nozzle to pull molten particles off the wire ends and deposit them on the substrate, creating a coating with strong adhesion and low porosity [8–12].

During the experiments, 65G steel was used as the substrate material, and 30KhGSA alloy was used as the coating. The study was conducted under several sputtering modes, in which the wire feed rate was varied in the range from 5 to 9 cm/s, while the voltage, compressed air pressure, sputtering distance and other parameters remained unchanged. During operation of the equipment, it was found that varying the wire feed speed had a direct effect on the amperage. This speed range was selected as the optimum range to ensure a stable sputtering process and a high-quality coating. Detailed parameters of spraying modes are presented in Table 3.

The phase composition of the coatings after metallization was analyzed using an X'Pert Pro X-ray diffractometer (PANalytical, Netherlands), enabling both qualitative and quantitative identification of crystalline phases. Measurements were conducted at wire feed rates ranging from 5 to 9 cm/s, under a voltage of 45 kV and a

current of 40 mA, using Cu-K α radiation within a 2 θ angular range of 20° to 90°, with a step size of 0.02°.

Table 3. Spray parameters for high-speed arc metallization using the SX600 machine.

Sample Name	Wire feed speed, cm/s	Current strength, A	Voltage, V	Compressed air pressure, atm	Spraying distance, cm
W1	5	200	30	9	40
W2	7	200	40	9	40
W3	9	200	45	9	40

To examine the microstructure of the coating cross-sections, scanning electron microscopy (SEM) was employed. The analysis was performed on a Tescan Vega 4 SEM (Tescan, Brno, Czech Republic) equipped with an energy-dispersive spectroscopy (EDS) system for elemental composition analysis.

Microhardness testing was conducted using the Vickers method on a Metolab 502 device (Metolab, Russia). The measurements were taken under a load of 0.2 N with a dwell time of 10 seconds, using a diamond pyramid indenter with a face angle of 136°.

Tribological performance was evaluated on a TRB3 tribometer (Anton Paar GmbH, Austria) using the ball-on-disk method. A 3 mm diameter steel ball made of ShH15 steel served as the counterbody. The tests were carried out under a 10 N normal load, with a linear sliding speed of 3 cm/s and a wear track radius of 1.50 mm, resulting in a total sliding distance of 70 meters.

RESULTS AND DISCUSSION.

In general, metallization is one of the key areas of our work, which we have been engaged in for a long time. As in previous studies, we conducted a number of tribological, corrosion and microstructural tests. Several series of experiments were carried out using 65G steel and the most optimal variant was selected based on the data obtained. Coatings formed by electric arc metallization result from the rapid deposition and solidification of molten metal droplets, creating a multilayered structure visible in SEM images (Figure 1). This layered structure, present under all process conditions, enhances wear and corrosion resistance [13]. This structure prevents the propagation of cracks and penetration of aggressive substances, which increases the service life of the protective layer.

Despite their advantages, the coatings contain defects such as pores and oxide inclusions. As noted by Li et al. [14–16], pores form due to air entrapment during the cooling of molten particles and can reduce corrosion resistance by allowing corrosive agents to reach the substrate. SEM images (Figure 1) show that porosity varies with the wire feed rate (5-9 cm/s). In addition to the general SEM images, Figures 1a', 1b', and 1c' show enlarged fragments of the corresponding samples, allowing for a more detailed analysis of the particle distribution, porosity, and possible defects in the coating structure.

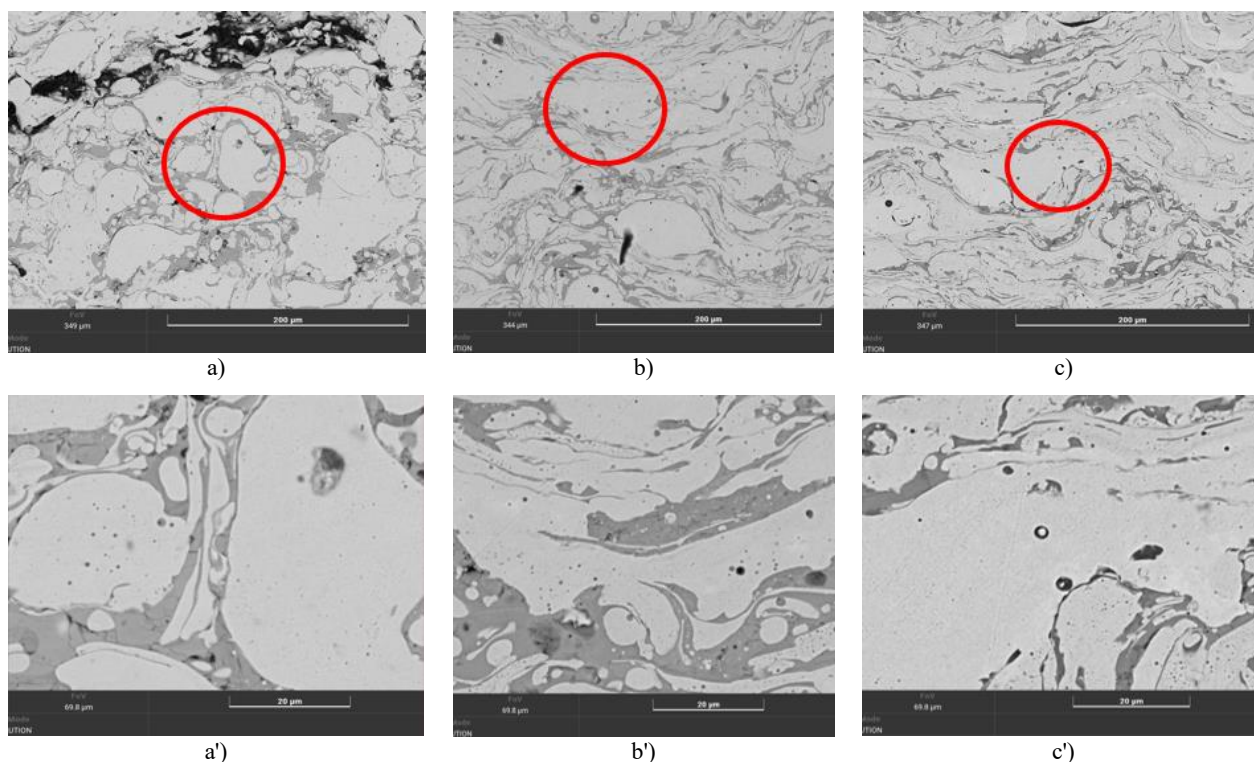


Figure 1. The microstructure of the coatings obtained by the SEM method: (a), (b), (c) is a general view of the surface structure of the coatings corresponding to samples W1, W2, and W3, respectively; (a'), (b'), (c') are enlarged fragments demonstrating porosity and particle distribution in local zones

Thus, although the 9 cm/s regime (W3) provides the highest hardness and lowest porosity, the increase in friction coefficient and decrease in adhesion indicate reduced stability during operation. The 7 cm/s coating (W2) demonstrates an optimal balance between thickness, hardness, adhesion, porosity, and tribological behavior. Therefore, this feed rate can be considered the most effective for producing wear-resistant and reliable coatings under abrasive conditions.

At the minimum wire electrode feed rate of 5 cm/s (sample W1), the porosity of the coating at the level of 3.5% is recorded, and its structure is characterised by irregularity. The microstructural images obtained by SEM show fluctuations in the thickness of individual layers and their density. This is explained by the insufficient energy of the melt particles deposited on the substrate, as a result of which the degree of interparticle bonding is reduced, which favours the formation of pores. Studies [17], indicate that at reduced sputtering rates, lower deposition rates are observed, increasing the probability of void formation and reducing the adhesion between layers.

At a feed rate of 7 cm/s (sample W2), the porosity decreases to 2.7% and the structure becomes more uniform. SEM images confirm that the microdroplets are deposited more uniformly, improving the density and uniformity of the coating. The paper [18], indicates that increasing the feed rate improves the coating density, reducing porosity and increasing corrosion resistance, since fewer pores limit the penetration of corrosive agents.

At the maximum wire feed rate of 9 cm/s (sample W3), the obtained coating is characterised by the lowest level of porosity – about 1.3%, and its structure is characterised by high density and uniformity. The increased kinetic energy of molten particles in this mode favours their deeper penetration into the substrate and improves adhesion between successive layers. As a result, a uniform layer with strong internal bonding is formed. As noted in the study [19], such dense coatings effectively prevent the penetration of aggressive media, which positively affects the anti-corrosion and wear resistance characteristics of the material. Microstructure analysis using SEM confirms the presence of an almost continuous coating with pronounced interlayer cohesion.

In addition to porosity, oxide inclusions are often observed in coatings produced by arc metallisation. They are formed as a result of the interaction of molten particles with air oxygen both during flight and at the moment of contact with the substrate. These inclusions are predominantly concentrated in the pores and at the boundaries between the layers, indicating that the oxidation intensity is related to the deposition modes. As noted in [20], excessive oxide content can lead to a decrease in the strength characteristics of the coating. At the same time, a moderate amount of oxides can have a positive effect – for example, some studies [21], demonstrate that the presence of oxide phases in FeAl/Cr₃C₂ type composite systems contributes to improved wear resistance and increased adhesion between coating layers [21].

X-ray phase analysis showed the presence of oxides (Fe_3O_4 , Fe_2O_3) in the samples. The highest amount of them was found in sample W1 and the lowest in W3. This is due to less development of oxidation processes at higher wire feed speed.

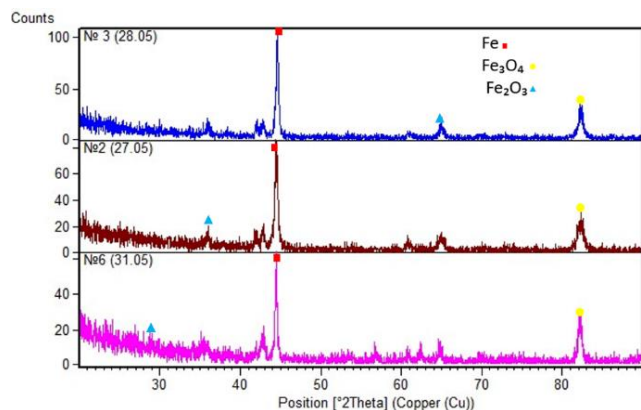


Figure 2: Results of X-ray phase analysis

Table 4 shows data on physical and mechanical characteristics of coatings obtained at different wire feed rates, including microhardness values (Vickers at HV0.1/10 load). The analysis of the obtained results demonstrates a stable dependence between the increase in feed rate and microhardness growth. Thus, at the minimum feed rate of 5 cm/s (sample W1) the lowest value of microhardness was recorded – 258 HV, which is associated with increased porosity and less dense structure of the layer. This is due to insufficient particle energy, which reduces the interlayer bonding strength. In contrast, at a maximum feed rate of 9 cm/s (sample W3), the microhardness increases to 305 HV. This increase is attributed to the more intense impact of molten particles, which favours the formation of a dense and uniform coating with improved interlayer cohesion [22].

Table 4. Summary physical and mechanical properties of coatings at different wire feed rates

Samples	Hardness (HV)	Porosity, %	R_a , μm	Friction Coefficient
W1	258	3.5 ± 0.25	10.9	0.46 ± 0.06
W2	278	2.7 ± 0.27	16.2	0.42 ± 0.05
W3	305	1.3 ± 0.06	25.4	0.53 ± 0.02

The variations in the structure and properties of the coatings with changes in the wire feed rate are primarily attributed to the changes in kinetic energy and thermal balance in the spray zone. At lower feed rates (5 cm/s), the amount of molten material is reduced, and the droplets have lower kinetic energy, resulting in weaker flattening upon impact with the substrate. This leads to higher porosity, less cohesion between splats, and a looser microstructure. Increasing the feed rate (to 7 cm/s) improves particle energy and volume, leading to better pore filling, enhanced splat bonding, and denser coatings. However, at excessively high feed rates (9 cm/s), turbulence and partial cooling of particles before reaching the

substrate may occur, which can reduce adhesion and increase residual stresses [23–24]. Thus, the observed variations in coating properties reflect a balance between kinetic, thermal, and structural factors in the deposition process.

Figure 3 shows the dynamics of the coefficient of friction for three coating samples (W1, W2, W3) obtained at different wire feed speeds as a function of the traveled distance. All samples show an initial sharp increase in the coefficient of friction (up to 20 m) due to surface adaptation, reaching ~ 0.4 for W1 (low speed) and W2, and 0.5 for W3 (maximum speed, denser structure). The coefficient then stabilizes at levels of ~ 0.46 (W1), ~ 0.42 (W2), and ~ 0.53 (W3), indicating the formation of a stable contact layer. The dense structure of W3 provides higher wear resistance but also a higher coefficient of friction [25]. The initial stage involves the destruction of spray microdefects, after which the particles are compacted to form a stable, cohesive and wear-resistant layer.

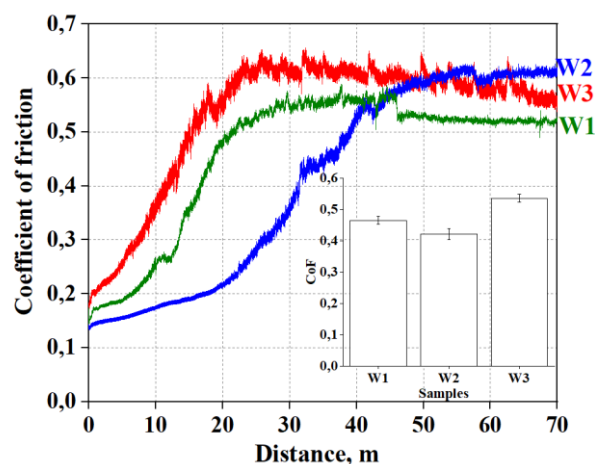


Figure 3. Dependence of friction coefficient

CONCLUSION

For coating application we used a supersonic arc metallization unit SX-600 (Guangzhou, China), in which the wire is melted using an electric arc, and then the atomized melt is transported by air flow to the surface to be treated [25]. This method allows to form a dense adhesion layer (see Figure 1). In the course of the experiment, the influence of the wire feed speed in the range from 5 to 9 cm/s on the characteristics of the obtained coatings was studied.

The influence of wire feed speed (5–9 cm/s) was analyzed, revealing the following:

- Increased feed speed enhances the coating microstructure due to higher particle kinetic energy.
- At 9 cm/s, the coating demonstrates the lowest porosity (1.36%) and highest microhardness (297 HV).
- At 5 cm/s, porosity rises to 3.58%, reducing corrosion resistance due to structural defects.

Higher feed rates result in denser coatings with improved wear and corrosion resistance, though they also lead to a slightly increased coefficient of friction.

Acknowledgments

This research is funded by the Committee of Science of the Ministry of Science of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (Grant No. BR21882370).

REFERENCES

1. Rakhadilov, B.; Zhurerova, L.; Sagdoldina, Z.; Kenesbekov, A.; Bayatanova, L. Morphological Changes in the Dislocation Structure of Structural Steel 20GL after Electrolytic-Plasma Hardening of the Surface // *J. Surf. Investig. X-Ray Synchrotron Neutron Tech.* – 2021. – Vol. 15. – P. 408–413.
2. Wielage, B.; Wank, A.; Rupprecht, C. Tailoring of Wire Feedstock and Processing Conditions in High Velocity Combustion Wire Spraying. In *Proceedings of the ITSC2006-ASM International*, Seattle, WA, USA, May 15-18, 2006. – P. 1009–1014.
3. Gornik, M.; Jonda, E.; Latka, L.; Nowakowska, M.; Godzierz, M. Influence of spray distance on mechanical and 4. tribological properties of HVOF sprayed WC-Co-Cr coatings // *Mater. Sci.-Pol.* – 2021. – Vol. 39. – P. 545–554.
4. Boinovich, L.B.; Domantovsky, A.G.; Emelyanenko, A.M.; Emelyanenko, K.A. Synergism of Arc Spraying, Laser Processing, and Hydrophobization for Long-Lasting Corrosion Protection of MA8 Magnesium Alloy // *Adv. Eng. Mater.* – 2024, Early View. <https://doi.org/10.1002/adem.202401708>
5. Qiang, W.; Kang, M.; Liu, J.; Ndumia, J.N. Microstructure and Wear Performance of High-Velocity Arc Sprayed FeMnCrNiBNbAl Coating // *Coatings.* – 2024. – Vol.14. – P. 428. <https://doi.org/10.3390/coatings14040428>
6. Szymański, K.; Hernas, A.; Moskal, G.; Myalska, H. Thermally Sprayed Coatings Resistant to Erosion and Corrosion for Power Plant Boilers-A Review // *Surf. Coat. Technol.* – 2015. – Vol. 268. – P. 153–164. <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2014.10.046>
7. Wielage, B.; Pokhmurska, H.; Student, M.; Gvozdeckii, V.; Stupnyckyj, T.; Pokhmurskii, V. Iron-Based Coatings Arc-Sprayed with Cored Wires for Applications at Elevated Temperatures // *Surf. Coat. Technol.* – 2013. – Vol. 220. – P. 27–35.
8. Romankov, S.E.; Sagdoldina, Z.B.; Kaloshkin, S.D.; Kaevitser, E.V. Fabrication of Ti-Al composite coatings by the mechanical alloying method // *Phys. Met. Metallogr.* – 2008. – Vol. 106. – P. 67–75.
9. Tabieva, E.E.; Zhurerova, L.G.; Baizhan, D. Influence of electrolyte-plasma hardening technological parameters on the structure and properties of banding steel 2 // *Key Eng. Mater.* – 2020. – Vol. 839. – P. 57–62.
10. Popova, N.A.; Zhurerova, L.G.; Nikonenko, E.L.; Skakov, M.K. Effect of plasma electrolytic nitrocarburizing on phase composition of 0.3 C-1Mn-1Si-Fe steel // *Inorg. Mater. Appl. Res.* – 2017. – Vol. 8. – P. 130–135.
11. Kakimzhanov, D.N.; Rakhadilov, B.K.; Tyurin, Y.N.; Kolisnichenko, O.V.; Zhurerova, L.G.; Dautbekov, M.K. Influence of pulsed plasma treatment on phase composition and hardness of Cr₃C₂-NiCr coatings. Influence of pulsed plasma treatment on phase composition and hardness of Cr₃C₂-NiCr coatings // *Eurasian J. Phys. Funct. Mater.* – 2021. – Vol. 5. – P. 45–51.
12. Ramezani, M.; Mohd Ripin, Z.; Pasang, T.; Jiang, C.P. Surface engineering of metals: Techniques, characterizations and applications // *Metals.* – 2023. – Vol. 13. – P. 1299.
13. Kengesbekov, A.; Rakhadilov, B.; Sagdoldina, Z.; Buitkenov, D.; Dosymov, Y.; Kylyshkanov, M. Improving the efficiency of air plasma spraying of titanium nitride powder // *Coat.* – 2022. – Vol. 12. – P. 1644.
14. Rakhadilov, B.; Pogrebnyak, A.; Sagdoldina, Zh.; Buitkenov, D.; Beresnev, V.; Mukhamedova, A. Effect of Bilayer Thickness and Bias Potential on the Structure and Properties of (TiZr/Nb) N Multilayer Coatings as a Result of Arc-PVD Deposition // *Mater.* – 2022. – Vol. 15. – P. 7696. <https://doi.org/10.3390/ma15217696>
15. Rakhadilov, B.K.; Baizhan, D.R.; Sagdoldina, Z.B.; Buitkenov, D.B.; Maulet, M. Phase composition and structure of composite Ti/HA coatings synthesized by detonation spraying // *AIP Conf. Proc.* – 2020. – Vol. 2297. – P. 010001.
16. Rakhadilov, B.K.; Kenesbekov, A.B.; Kowalevski, P.; Ocheredko, Y.A.; Sagdoldina, Z.B. Development of air-plasma technology for hardening cutting tools by applying wear-resistant coatings // *News Natl. Acad. Sci. Repub. Kazakhstan.* – 2020. – Vol. 3. – P. 54–62.
17. Yu, H.L.; Zhang, W.; Wang, H.M.; Ji, X.C.; Song, Z.Y.; Li, X.Y.; Xu, B.S. In-situ synthesis of TiC/Ti composite coating by high frequency induction cladding // *J. Alloys Compd.* – 2017. – Vol. 701. – P. 244–255.
18. Sidorov, S.A.; Mironov, D.A.; Khoroshenkov, V.K.; Khlusova, E.I. Surfacing methods for increasing the service life of rapidly wearing working tools of agricultural machines // *Weld. Int.* – 2016. – Vol. 30. – P. 808–812.
19. Sun, R.; Shi, Y.; Pei, Z.; Li, Q.; Wang, R. Heat transfer and temperature distribution during high-frequency induction cladding of 45 steel plate // *Appl. Therm. Eng.* – 2018. – Vol. 139. – P. 1–10.
20. Hui, R.; Wang, Z.; Kesler, O.; Rose, L.; Jankovic, J.; Yick, S.; Ghosh, D. Thermal plasma spraying for SOFCs: Applications, potential advantages and challenges. Thermal plasma spraying for SOFCs: Applications, potential advantages, and challenges // *J. Power Sources.* – 2007. – Vol. 170. – P. 308–323.
21. Chahal, H.K.; Matthews, S.; Jones, M.I. Fabrication of calcium phosphate coatings by the inflight reaction of precursor feedstocks using plasma spraying. *J. Therm. Spray Technol.* – 2023. – Vol. 32. – P. 1465–1481.
22. Qadir, D.; Sharif, R.; Nasir, R.; Awad, A.; Mannan, H.A. A review on coatings through thermal spraying // *Chem. Pap.* – 2024. – Vol. 78. – P. 71–91.
23. Liao, X.J.; Zhang, L.; Sun, Y.Q.; Luo, X.T.; Li, C.X.; Yang, G.J.; Li, C.J. Effect of Inter-Splat Bonding Quality on the Dependence of Wear Behavior of Plasma-Sprayed Stainless Steel Coating on Applied Load // *J. Therm. Spray Technol.* – 2024. – Vol. 33. – P. 1–11.
24. Abdivakhidov, K.; Sharipov, K. Corrosion-resistant protective coatings for metals: A review of metallic and non-metallic coatings // *AIP Conf. Proc.* – 2024. – Vol. 3045. – P. 060011.
25. Rakhadilov, B.K.; Buitkenov, D.B.; Apsezhanova, A.K.; Kakimzhanov, D.N.; Nabioldina A.; Magazov, N.M.; Selection of Optimal Process Parameters for Arc Metallization // *Coatings.* – 2025. – Vol. 15(3). – P. 300. <https://doi.org/10.3390/coatings15030300>

**СЫМ БЕРУ ЖЫЛДАМДЫҒЫ ӘРТҮРЛІ БОЛҒАН ЖАҒДАЙДА
ЭЛЕКТР ДОҒАЛЫ МЕТАЛДАНДЫРУ ӘДІСІМЕН АЛЫНҒАН
ЖАБЫНДАРДЫҢ ҚҰРЫЛЫМЫ МЕН ҚАСИЕТТЕРІН ЗЕРТТЕУ**

Б. К. Рахадиллов^{1,2}, Д. Б. Бүйіткенов³, А. Қ. Әпсежанова^{1*}, Н. М. Магазов¹, Е. С. Молбосынов¹

¹ Д. Серікбаев атындағы Шығыс Қазақстан техникалық университеті, Өскемен, Қазақстан

² «Plasma Science» ЖШС, Өскемен, Қазақстан

³ С. Аманжолов атындағы Шығыс Қазақстан университеті, Өскемен, Қазақстан

* Байланыс үшін E-mail: akbotaapsezanova@mail.com

Бұл жұмыста 30ХГСА маркалы сымды пайдалана отырып, электр доғалық металлизация әдісімен алынған жабындардың құрылымы мен қасиеттеріне сым беру жылдамдығының әсері зерттелді. Жабындар 65Г болат негізінде 5, 7 және 9 см/с жылдамдықпен жоғары жылдамдықты доғалық бүрку технологиясы арқылы алынды. Микроструктуралық талдау, ЭДС-карталау, рентгенфазалық талдау, жабындардың қалыңдығы, қаттылығы, кеуектілігі мен адгезиясы зерттелді. Нәтижелер көрсеткендей, сым беру жылдамдығын арттыру жабын қалыңдығының өсуіне әкелді, бірақ құрылымдық біртектілігіне де әсер етті. 5 см/с кезінде жабын жақсы адгезияға және біркелкі құрылымға ие болды, бірақ жұқа болды. 7 см/с кезінде ең оңтайлы нәтижелер байқалды: қалыңдығы 220 мкм дейін, кеуектілік – 4,3%, қаттылық – 720 HV дейін. 9 см/с кезінде қабат қалыңдады, бірақ кеуектілік артты, ал адгезия төмендеді. Осылайша, сым беру жылдамдығы жабын сапасына елеулі әсер етеді және оны оңтайландыру жабынның пайдалану қасиеттерін басқаруға мүмкіндік береді.

Түйін сөздер: кеуектілік, электр доғалы металдандыру, жабын, болат, құрылым, болат сым.

**ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ ПОКРЫТИЙ,
ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ЭЛЕКТРОДУГОВОЙ МЕТАЛЛИЗАЦИИ
ПРИ РАЗЛИЧНЫХ СКОРОСТЯХ ПОДАЧИ ПРОВОЛОКИ**

Б. К. Рахадиллов^{1,2}, Д. Б. Бүйіткенов³, А. Қ. Әпсежанова^{1*}, Н. М. Магазов¹, Е. С. Молбосынов¹

¹ Восточно-Казахстанский технический университет им. Д. Серикбаева, Усть-Каменогорск, Казахстан

² ТОО «Plasma Science», Усть-Каменогорск, Казахстан

³ Восточно-Казахстанский университет им. С. Аманжолова, Усть-Каменогорск, Казахстан

* E-mail для контактов: akbotaapsezanova@mail.com

В работе исследовано влияние скорости подачи проволоки на структуру и свойства покрытий, полученных методом электродуговой металлизации с использованием проволоки 30ХГСА. Покрытия наносились на подложки из стали 65Г при различных скоростях подачи (5, 7 и 9 см/с) с применением технологии сверхзвукового дугового напыления. Проведены микроструктурный анализ, ЭДС-картирование, рентгенофазовый анализ, измерения толщины покрытий, твёрдости, пористости и адгезии. Результаты показали, что увеличение скорости подачи проволоки приводит к увеличению толщины покрытия, однако влияет и на его однородность. При 5 см/с наблюдалась хорошая адгезия и равномерная структура при меньшей толщине. При 7 см/с достигнут оптимальный результат: толщина до 220 мкм, пористость 4,3%, твёрдость до 720 HV. При 9 см/с толщина возросла, но также увеличилась пористость и снизилась адгезия из-за турбулентного распыления. Таким образом, скорость подачи проволоки существенно влияет на качество покрытий, а её оптимизация позволяет управлять эксплуатационными характеристиками покрытий для применения в условиях повышенного абразивного износа.

Ключевые слова: пористость, электродуговая металлизация, покрытие, сталь, структура, стальная проволока.

<https://doi.org/10.52676/1729-7885-2025-4-119-126>

УДК 621.039.536

ВВЭР-1000 РЕАКТОРЫНЫҢ ЖБҚ ІШІНДЕ БІРІНШІ ОТЫНДЫҚ ЦИКЛДАН КЕЙІНГІ РАДИОНУКЛИДТЕРДІҢ ЖИНАЛУЫН ЕСЕПТЕУ

Д. М. Секен*, А. С. Сураев, Н. Е. Мухамедов, Р. А. Иркимбеков, О. М. Жанболатов

ҚР ҰЯО РМК «Атом энергиясы институты» филиалы, Курчатов, Қазақстан

* Байланыс үшін E-mail: seken@nnc.kz

Жұмыста MCNP6 кодын [1] және ENDF/B-VII кітапханаларын [2] пайдалана отырып, бірінші отын циклынан кейін ВВЭР-1000 реакторында радионуклидтердің жинақталуын нейтрондық-физикалық модельдеу ұсынылған. Негізгі ұзақ өмір сүретін бөлу өнімдерін (^{90}Sr , ^{99}Tc , ^{137}Cs , ^{129}I және т.б.), актиноидтарды (Np, Pu, Am), асыл газдарды (Kr, Xe), сондай-ақ аэрозольді және құрамында йод бар радионуклидтерді құру бойынша есептеулер жүргізілді. Қалдық белсенділікті және жинақталған изотоптардың радиациялық қауіпсіздікке әсерін бағалауға ерекше назар аударылды. Зерттеу пайдаланылған ядролық отын (ПЯО) – мен және қатты радиоактивті қалдық (КРК) – мен жұмыс істеу стратегияларын әзірлеу, сақтау қоймаларын жобалау, Қазақстан Республикасында экологиялық тәуекелдерді бағалау және атом энергетикасын дамыту үшін қолданбалы мәнге ие.

Түйін сөздер: отынның жануы, радионуклидтер, пайдаланылған ядролық отын, қатты радиоактивті қалдықтар, белсенділік, радиациялық қауіпсіздік, нейтрондық-физикалық есептеулер, MCNP.

КІРІСПЕ

Электр энергиясының орнықты көзі ретінде ядролық энергетиканы дамыту экологиялық қауіпсіздік мәселелеріне, атап айтқанда, пайда болатын радиоактивті қалдықтармен жұмыс істеуге ерекше назар аударуды талап етеді. Атом электр станцияларының әлеуетті қауіптілігін айқындайтын түйінді факторлардың бірі ядролық реакторларды пайдалану процесінде радионуклидтердің жинақталуы болып табылады. Бөліну, басып алу және белсендіру нәтижесінде пайда болатын ұзақ өмір сүретін нуклидтерге ерекше назар аудару керек, өйткені олар жүздеген және мыңдаған жылдар бойы радиоуыттылығын сақтайды және отынның жануынан бастап оның соңғы оқшаулануына дейінгі барлық кезеңдерде ұзақ бақылауды талап етеді.

ВВЭР-1000 үлгісіндегі реакторлардың белсенді аймағы жағдайында бөлу өнімдері ғана емес, сондай-ақ актиноидтар, асыл газдар, аэрозольді нуклидтер, сондай-ақ йод изотоптары мен лантаноидтар жинақталады. Олардың көпшілігі реактордың нейтрондық-физикалық сипаттамаларына, отынды түсіргеннен кейін жылу бөлуге және ұзақ мерзімді сақтау параметрлерін негіздеуге әсер етеді. Мысалы, ксенон мен самарийдің изотоптары қуатты нейтрондық жұтқыштар болып табылады, ал ^{99}Tc мен ^{129}I қоршаған ортада өте ұтқыр және тіпті аз шоғырлануда да радиоуытты болып табылады.

Реактор жұмысының қауіпсіздігін бағалау, пайдаланылған отынмен жұмыс істеудің тиімді стратегияларын әзірлеу үшін, сондай-ақ Қазақстан Республикасында бірінші атом электр станциясын жоспарлау кезінде неғұрлым қауіпті радионуклидтердің жинақталуын модельдеуді жүргізу қажет. ENDF/B-VII кітапханаларымен MCNP6 сияқты қазіргі заманғы кодтарды пайдалану отын жанғаннан кейін оның

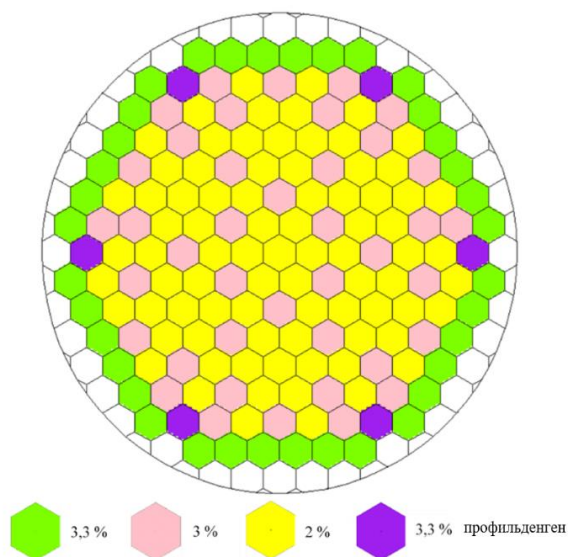
жоғары дәрежедегі сенімділігімен изотоптық құрамын есептеуге мүмкіндік береді.

MCNP6 бағдарламасын пайдалана отырып ВВЭР-1000 моделдеу бойынша есептеулер бұған дейін де сәтті жүргізілген, оның ішінде нейтрон-физикалық сипаттамалар да қарастырылған [3]. Осы жұмыс осы зерттеулердің қисынды жалғасы болып табылады және қуаттың нақты профилін, өтпелі режимдерді және негізгі изотоптардың концентрацияларының өзгеру динамикасын ескере отырып, отынның жануын талдауға бағытталған.

Бұл жұмыс отын циклы аяқталғаннан кейін ВВЭР-1000 реакторында радионуклидтердің жинақталуын зерттеуге бағытталған. Жүргізілген талдау тұрақты негізде пайдалану жағдайында пайда болатын бөлу өнімдерін, актиноидтарды, инертті газдар мен аэрозольдерді қамтиды. Алынған нәтижелер нейтрондық-физикалық модельдерді верификациялау, ПЯО сақтау жүйелерін әзірлеу кезінде және ядролық-энергетикалық жобаларды іске асыру кезіндегі экологиялық тәуекелдерді бағалауда пайдаланылуы мүмкін.

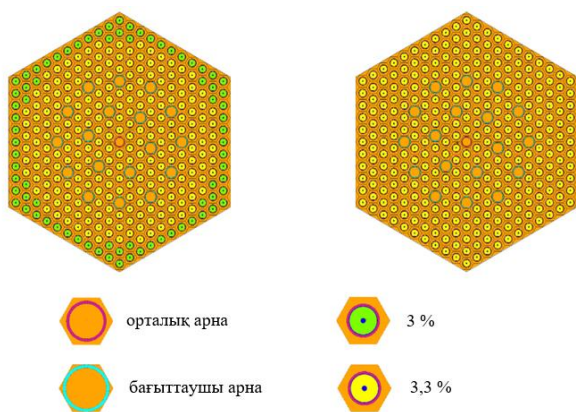
ЗЕРТТЕУ ОБЪЕКТІСІ

Көптеген атом станцияларында номиналды жылу қуаты 3000 МВт (1000 МВт электр) ВВЭР-1000 реакторы пайдаланылады. Реактордың белсенді аймағында жалпы отын (UO_2) жүктемесі 80,3 тонна болатын 163 жылу бөлгіш құрама (ЖБҚ) бар. Бастапқы активті аймақтағы отын партияларының саны 2% (^{235}U), 3% (^{235}U) және 3,3% (^{235}U) байытылған 4 партияны құрайды [4]. Профильденген ЖБҚ-да 3% (^{235}U) байытылған перифериялық отын элементтері бар (1-сурет). Активті аймақтың отын бөлігінің биіктігі 3530 мм, ал ЖБҚ арасындағы қашықтық 236 мм құрайды [5, 6].



1-сурет – ВВЭР-1000 реакторының активті аймағының конфигурациясы

ВВЭР-1000 реакторының ЖБҚ «кілт бойынша» өлшемі 234 мм болатын конструкция болып табылады және оның құрамына 312 отын элементі (твэл) кіреді, олар бір-бірінен 12,75 мм қадаммен теңбұрышты үшбұрышты схема бойынша біркелкі орналасқан (2-сурет). Әрбір ЖБҚ-да энергия бөлуді өлшеу датчиктерін орнату үшін 18 бағыттаушы арна және бір орталық арна орналастырылған. Бағыттаушы арналар тот баспайтын болаттан жасалған, ал орталық канал үшін 1% ниобий қосылған цирконий қорытпасы пайдаланылады. Орталық арнаның диаметрі 11 мм, әрбір бағыттаушы арнаның диаметрі 12,6 мм, ал олардың қабырғасының қалыңдығы 0,8 мм-ге тең.



2-сурет – ВВЭР-1000 реакторының профилденген (сол жақта) профилденбеген (оң жақта) ЖБҚ-сы

Твэл герметикалық сыртқы қабықшадан тұрады, оның ішінде отын орналастырылады және бөлу өнімдері оқшауланады. Твэлге тығыздығы 10400 кг/м³ уран диоксидінен жасалған цилиндрлік таблеткалар орналастырылған, әрқайсысының сыртқы диаметрі 7,53 мм. Отын бағанасының жалпы ұзындығы – 3530 мм. Отын таблеткасының ортасында шеттерін-

де фаскалары бар диаметрі 1,4 мм саңылау бар, бұл таблетка мен қабық арасындағы саңылаумен бірге таблетканың радиациялық ісінуінен ұлғаюын өтеуге мүмкіндік береді. Цирконий қорытпасынан жасалған твэлдің қабықшасы конструкцияның беріктігін қамтамасыз етеді, оның өлшемдерін тұрақты сақтайды және отынды жылу тасымалдағыштан туындаған коррозия мен эрозиядан қорғайды. Қабықшаның ішкі радиусы – 3,9 мм, ал сыртқы радиусы – 4,55 мм. Қабықша 1% ниобий қосылған цирконий қорытпасынан жасалған, ал отын мен қабықша арасындағы саңылау гелиймен толтырылған.

ВВЭР-1000 реакторында басқару және қорғау жүйесі реттеу органының 61 кластері орнатылған. Жүйеде 18 сіңіргіш элемент пайдаланылады, олардың жоғарғы бөлігі тығыздығы 1700 кг/м³ (В₄С құрамында табиғи ¹⁰B ≈ 19,9%, ¹¹B ≈ 80,1%) бор карбидінен, ал төменгі бөлігі тығыздығы 4900 кг/м³ (Dy₂O₃·TiO₂, диспрозий табиғи изотоптық құрамда) диспрозия титанатынан жасалған. Сіңіргіштің толық биіктігі 3530 мм құрайды, бұл ретте жоғарғы бөлігінің биіктігі – 3230 мм, ал төменгі бөлігінің биіктігі – 300 мм. Сіңіргіш элементтер қабығының сыртқы диаметрі 0,6 мм қалыңдығы 8,2 мм құрайды және ол тот баспайтын болаттан жасалған.

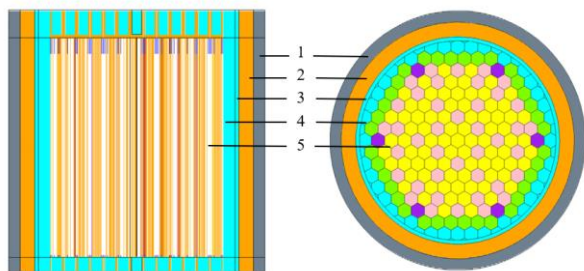
НЕЙТРОНДЫ-ФИЗИКАЛЫҚ МОДЕЛЬ

ВВЭР-1000 реакторының барлық активті аймағын нейтрондық талдауды орындау үшін ENDF/B-VII.0 ядролық деректер кітапханаларын пайдалана отырып, Монте-Карло әдісіне негізделген компьютерлік MCNP6 коды пайдаланылды.

MCNP6 кодында отынның жануын есептеу реакторды пайдалану процесінде отынның изотоптық құрамының өзгерістерін ескеруге мүмкіндік беретін BURN есептік модулін пайдалана отырып орындалады. Бұл модуль уақытша қадамдарды (TIME), реактордың қуатын (POWER), сәулеленетін материалдарды (MAT) және изотоптардың ең аз шоғырлануын (AFMIN) қоса алғанда, отынның жануын есептеу параметрлерін белгілейді. BURN-ді есепке енгізу отын циклы бойына белсенді аймақтың нейтрондық-физикалық сипаттамаларын неғұрлым дәл болжауға мүмкіндік береді және реактор моделін дұрыс верификациялауға ықпал етеді.

3-суретте MCNP6 кодының көмегімен әзірленген ВВЭР-1000 реакторының активті аймағының толық геометриялық моделі көрсетілген. Модель ВВЭР-1000 реакторының активті аймағының барлық өлшемдік-материалдық сипаттамаларын дәл сипаттайды және активті аймақтың барлық қажетті компоненттерін қамтиды: (1) жылу бөлетін элементтері бар отын құрастырмалары, (2) жоғарғы, төменгі және бүйірлік шағылыстырғыштар, (3) қуатты реттеу органдары, (4) конструкциялық элементтер. Модельді визуализациялау VisEd редакторында орындалған, оны пайдалану модельдің құрылымы мен орналасуын көрнекі түрде көрсетуге мүмкіндік береді, бұл оны құру мен жөндеуді жеңілдетеді.

ВВЭР-1000 РЕАКТОРЫНЫҢ ЖБҚ ІШІНДЕ БІРІНШІ ОТЫНДЫҚ ЦИКЛДАН КЕЙІНГІ РАДИОНУКЛИДТЕРДІҢ ЖИНАЛУЫН ЕСЕПТЕУ



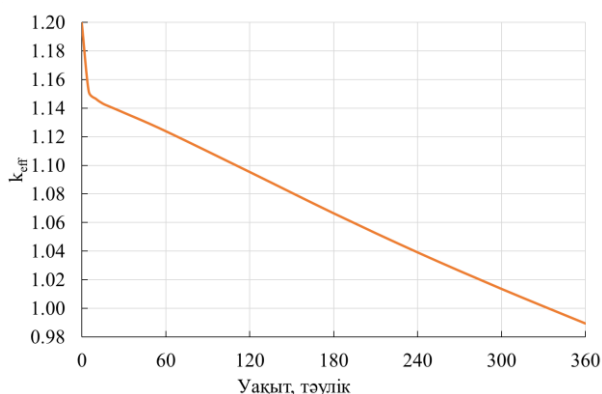
1 – корпус, 2 – шағылыстырғыш, 3 – шахта, 4 – қоршау, 5 – активті аймақ

3-сурет – Реакторлық есептік моделінің графикалық көрінісі

ЕСЕПТЕМЕЛЕРДІҢ НӘТИЖЕСІ

Моделді верификациялау үшін нейтрондардың көбею коэффициенті бор шоғырлануы 600 ppm, ал жылу тасығыш пен отын температурасы 300 К болған жағдайда есептелген. Жұмыс тобын (№ 10 топ) басқару өзектері негізден 80% қашықтықта бекітілген деп болжанады [7]. Бұл ереже басқару өзектерінің орташа мәні ретінде қабылданды, өйткені жұмыс тобы цикл ішінде 70% -дан 90% -ға дейін қозғалады. k_{eff} мәні $1,13518 \pm 0,00007$, ал әдеби деректер бойынша 1,13554 тең екені анықталды. Салыстырмалы қателік 0,032% құрады.

5-суретте реактордың жұмысын бір науқан ішінде номиналды қуатта модельдеу кезінде нейтрондардың көбеюінің тиімді коэффициентін өзгерту кестесі көрсетілген, бұл ретте келесі шарттар қабылданған: отынның температурасы 600 К, жылу тасымалдағыштың температурасы – 600 К, жылу тасымалдағыштың тығыздығы – 700 кг/м³, ал реактордың жылу қуаты – 3000 МВт, бор қышқылының.



4-сурет – k_{eff} мәндерін уақыт бойынша өзгеруі

Ұзақ өмір сүретін нуклидтер бойынша верификация. 1-кестедегі нуклидтер 10 жылдан астам жартылай ыдырау кезеңіне ие және пайдаланылған ядролық отынның жалпы радиоактивтілігіне барынша үлес қосады. Олардың қасиеттерін, көші-қон қабілетін және биосфераға әсер ету дәрежесін зерделеу радиоактивті қалдықтармен жұмыс істеу стратегиясын негіздеу, көму немесе қайта өңдеу түрін таңдау,

сондай-ақ әртүрлі пайдалану сценарийлері мен авариялық жағдайлар кезіндегі әлеуетті салдарларды бағалау үшін қажет.

Ядролық реакторды ұзақ уақыт пайдалану кезінде (номиналды қуатында 100 жылдан астам) бөлу өнімдерінің радиоактивтілік деңгейі тепе-теңдік жағдайына жетеді. Бұл кезеңде радиоактивтілікке ⁹⁰Sr үлкен үлес қосады. Оның шоғырлануы және тиісінше радиоактивтіліктің жалпы деңгейі отын циклінің типіне байланысты. Мысалы, ашық отын циклы үшін ол шамамен $2,4 \cdot 10^{17}$ л Н₂O/ГВт қуатты құрайды, ал тұйық циклда PWR типті реакторларда оксидті отынды пайдаланумен бұл көрсеткіш $1,2 \cdot 10^{17}$ л Н₂O/ГВт дейін төмендейді [8]. Алайда ұзақ мерзімді перспективада – АЭС-ті пайдалану аяқталғаннан кейін бірнеше жүз жылдан кейін – қауіптіліктің жоғары деңгейін сақтайтын және пайдаланылған ядролық отынмен жұмыс істеу кезінде ерекше көңіл бөлуді талап ететін басқа да ұзақ өмір сүретін радионуклидтер: ⁹⁹Tc, ¹²⁹I, ¹²⁶Sn және ⁹³Zr айқын-даушы маңызға ие бола бастайды.

1-кесте – Бөлу өнімдерінің құрамына кіретін ұзақ өмір сүретін негізгі нуклидтердің түзілуі

Нуклид	Жартылай ыдырау кезеңі, жыл	[7] деректері бойынша 1 жылда жинақталуы, кг	Есептеу нәтижелері бойынша 1 жылда жинақталуы, кг	Салыстырмалы қателік, %
⁹⁰ Sr	28,6	19,30	20,29	5,13
⁹⁹ Tc	$2,12 \cdot 10^5$	27,10	26,67	1,59
¹²⁶ Sn	$2,30 \cdot 10^5$	0,63	0,54	14,28
¹²⁹ I	$1,57 \cdot 10^7$	6,15	4,62	24,88
¹³⁵ Cs	$2,30 \cdot 10^6$	11,90	7,90	33,61
¹³⁷ Cs	30	41,50	41,12	0,91
¹⁵¹ Sm	90	0,41	0,38	7,32

Атом электр станциясын пайдалану процесінде қалыптасатын ұзақ өмір сүретін радиоактивтіліктің жинақталуы ядролық энергетиканың экологиялық және радиациялық салдарларын бағалау кезінде маңызды фактор болып табылады. Ұзақ өмір сүретін радиоактивтілік, ең алдымен, актиноидтардың және жартылай ыдыраудың ұзақ кезеңімен бөліну өнімдерінің болуымен байланысты.

Актиноидтардың жинақталуы. 2-кесте пайдалану циклі ішінде реакторда мұндай нуклидтердің қаншалықты қарқынды өндірілетінін талдауға мүмкіндік беретін радиоактивтіліктің сандық бағалауын қамтиды. Бұл деректер пайдаланылған ядролық отынмен жұмыс істеу стратегиясын таңдау үшін маңызды.

Актиноидты элементтер реактордың активті аймағында нейтрондарды ауыр ядролармен, атап айтқанда ²³⁸U, кейіннен β-ыдыраумен басып алудың жүйелі реакциялары нәтижесінде қалыптасады. Массасы мен радиоактивтілігі бойынша неғұрлым маңыздылардың қатарына плутоний (²³⁹Pu, ²⁴⁰Pu, ²⁴¹Pu) және ²³⁷Np изотоптары жатады. Олар пайдала-

ВВЭР-1000 РЕАКТОРЫНЫҢ ЖБҚ ІШІНДЕ БІРІНШІ ОТЫНДЫҚ ЦИКЛДАН КЕЙІНГІ РАДИОНУКЛИДТЕРДІҢ ЖИНАЛУЫН ЕСЕПТЕУ

нылған отынның ұзақ мерзімді белсенділігін анықтайды және оны сақтау, қайта өңдеу немесе қайта пайдалану мүмкіндігі кезінде ерекше тәсілді талап етеді.

2-кесте – Актиноидтардың құрылуы

Нуклид	Активтілігі, Бк	Массасы жылына, кг
²³⁴ U	$1,166 \cdot 10^{10}$	$5,067 \cdot 10^{-2}$
²³⁶ U	$3,885 \cdot 10^{11}$	$1,624 \cdot 10^2$
²³⁷ U	$1,497 \cdot 10^{18}$	$4,958 \cdot 10^{-1}$
²³⁹ U	$6,623 \cdot 10^{19}$	$5,340 \cdot 10^{-2}$
²³⁵ Np	$2,989 \cdot 10^9$	$5,760 \cdot 10^{-8}$
²³⁶ Np	$9,148 \cdot 10^6$	$1,878 \cdot 10^{-5}$
²³⁷ Np	$2,522 \cdot 10^{11}$	$9,668 \cdot 10^0$
²³⁸ Np	$3,600 \cdot 10^{17}$	$3,755 \cdot 10^{-2}$
²³⁹ Np	$6,601 \cdot 10^{19}$	$7,690 \cdot 10^0$
²³⁸ Pu	$4,326 \cdot 10^{10}$	$2,239 \cdot 10^{-6}$
²³⁷ Pu	$1,163 \cdot 10^{12}$	$2,577 \cdot 10^{-6}$
²³⁸ Pu	$9,842 \cdot 10^{14}$	$1,553 \cdot 10^0$
²³⁹ Pu	$8,014 \cdot 10^{14}$	$3,493 \cdot 10^2$
²⁴⁰ Pu	$6,300 \cdot 10^{14}$	$7,505 \cdot 10^1$
²⁴¹ Pu	$1,343 \cdot 10^{17}$	$3,512 \cdot 10^1$
²⁴² Pu	$9,065 \cdot 10^{11}$	$6,195 \cdot 10^0$

Асыл газдар мен ұшатын радионуклидтердің жинақталуы. ¹³³Xe, ¹³⁵Xe, ⁸⁵Kr және басқалары сияқты бөліну өнімдері жоғары радиоактивтілікке ие және реактордың нейтрондық-физикалық сипаттамаларына айтарлықтай әсер етеді (3-кесте). Есептеулерде ¹³⁵Xe изотопына ерекше назар аударылады, ол жылу нейтрондарын (~ 2,7·10⁶ барн) қармаудың үлкен қимасына ие. Бұл оны әсіресе қуаты төмендеген кезде немесе реактор тоқтағаннан кейін реактивтіліктің ксенондық тербелісін тудыруға қабілетті қуатты нейтронды уға айналдырады. Есептеулерде ¹³⁵Xe белсенділігі $1,06 \cdot 10^{18}$ Бк құрайтыны анықталды, бұл оның реактордың ауыспалы режимдегі әрекетіне әсерін ескеру қажеттігін растайды.

Жоғары активтілікке ие ¹³³Xe мен ⁸⁵Kr – тиісінше $6,25 \cdot 10^{18}$ Бк және $1,31 \cdot 10^{16}$ Бк кем емес. Бұл изотоптар іс жүзінде инертті және твэлдердің газ кеңістігінде жинақталады. Герметикалық бұзылған кезде олар жылу тасымалдағышқа шығады және радиациялық газ талдағыштардың көмегімен тіркелуі мүмкін, бұл оларды твэлдердің тұтастығының индикаторларына айналдырады.

Асыл газдар мен құрамында йод бар нуклидтердің массасы мен белсенділігінің есептелген мәндері 3-кестеде келтірілген. Салмағының аздығына қарамастан (жылына 1 кг-нан аз), олардың белсенділігі 10^{16} – 10^{18} Бк деңгейіне жетеді, бұл авариялық ағып кету кезінде әлеуетті радиациялық қауіптілікке және газ тазалау мен желдетудің тиімді жүйелерін жобалау қажеттілігіне себепші болады [9].

Ядролық отынның бөлінуі процесінде ВВЭР-1000 реакторының активті аймағында әртүрлі газ тәрізді және ұшатын радионуклидтер қалыптасады, олардың

ішінде йод (¹²⁹I, ¹³²I, ¹³¹I, ¹³⁵I), теллур (¹³²Te) изотоптарына ерекше назар аударуға болады. 3-кестеде көрсетілген есептеулер негізінде реакторды пайдаланудың бір жылда жинақталған олардың активтілігі мен массасына сандық бағалау жүргізілді.

3-кесте – Газ тәріздес және ұшатын нуклидтер

Нуклид	Активтілігі, Бк	Массасы жылына, кг
⁸⁵ Kr	$1,3109 \cdot 10^{16}$	$9,022 \cdot 10^{-1}$
¹³² Te	$4,3216 \cdot 10^{18}$	$3,846 \cdot 10^{-1}$
¹²⁹ I	$3,0213 \cdot 10^{10}$	$4,621 \cdot 10^0$
¹³⁰ I	$2,895 \cdot 10^{16}$	$4,008 \cdot 10^{-4}$
¹³¹ I	$3,0478 \cdot 10^{18}$	$6,635 \cdot 10^{-1}$
¹³⁵ I	$5,745 \cdot 10^{18}$	$4,393 \cdot 10^{-2}$
¹³³ Xe	$6,263 \cdot 10^{18}$	$9,039 \cdot 10^{-1}$
¹³⁵ Xe	$1,059 \cdot 10^{18}$	$1,126 \cdot 10^{-2}$

Құрамында йод бар барлық нуклидтердің ішінен ¹³⁵I – $5,74 \cdot 10^{18}$ Бк қысқа өмір сүретін изотопы оның қарқынды пайда болуымен және радиоактивтілігінің жоғары деңгейімен байланысты. Одан кейін ¹³¹I ($3,05 \cdot 10^{18}$ Бк) және ¹³⁰I ($2,89 \cdot 10^{16}$ Бк) келеді. Аса маңызды ¹³¹I болып табылады, өйткені ол жоғары биологиялық тиімділік пен қалқанша безінде шоғырлану қабілетінің арқасында ағып кету жағдайында персонал мен халық үшін ең үлкен қауіп төндіреді. Оның белсенділігі санитарлық нормативтердің деңгейімен салыстырылады және АЭС пайдалану кезінде қатаң бақылауды талап етеді. Ұзақ өмір сүретін ¹²⁹I салмағы 4,6 кг болғанда $3,7 \cdot 10^{10}$ Бк – ден аз белсенділікке ие, бұл оны қысқа мерзімді перспективада қауіпсіз етеді, алайда ол ұзақ мерзімді экологиялық перспективада жартылай ыдыраудың орасан зор кезеңіне (~16 млн жыл) байланысты әлеуетті қауіп төндіреді.

Сондай-ақ массасы 0,4 кг-нан кем болған кезде ¹³²Te – $4,3216 \cdot 10^{18}$ Бк айтарлықтай белсенділікті көрсетеді, бұл оны твэлдердің бұзылуы мен герметикалықтың бұзылуының бастапқы кезеңдерінің маңызды маркеріне айналдырады.

Отын циклынан кейінгі аэрозольдық белсенділік және радиациялық әсерді бағалау. Аэрозольдер отын жанғаннан кейін радиоактивті заттарды қоршаған ортаға тасымалдаудың маңызды нысандарының бірі болып табылады. Көбінесе инертті радиоактивті газдардың бөліну өнімдері мен еншілес изотоптарынан құралатын аэрозольдер күрделі нуклидті құраммен және жоғары радиобиологиялық қауіптілікпен сипатталады. Олардың ішіндегі ең маңыздысы ⁸⁹Sr, ⁹⁰Sr, ⁹⁵Zr, ⁹⁹Mo, ¹⁰³Ru, ¹⁰⁶Ru, ¹³⁴Cs, ¹⁴¹Ce и ¹⁴⁴Ce және басқа да [10] нуклидтер болып табылады, олар бойынша деректер 4-кестеде келтірілген.

Қаралған аэрозольді нуклидтер арасында цирконий мен рутений изотоптары неғұрлым белсенділікті көрсетеді: ⁹⁵Zr ($5,19 \cdot 10^{18}$ Бк), ¹⁰³Ru ($4,03 \cdot 10^{18}$ Бк) және ¹⁰⁶Ru ($6,62 \cdot 10^{17}$ Бк). Бұл нуклидтер авариялық шығарындылардан кейін және твэлдердің зақымдалу жағдайында қалдық радиоактивтілікті қалыптасты-

ВВЭР-1000 РЕАКТОРЫНЫҢ ЖБҚ ІШІНДЕ БІРІНШІ ОТЫНДЫҚ ЦИКЛДАН КЕЙІНГІ РАДИОНУКЛИДТЕРДІҢ ЖИНАЛУЫН ЕСЕПТЕУ

руда негізгі рөл атқарады. Сондай-ақ отынның жану индикаторы ретінде жиі қолданылатын және твэлді бұзғаннан кейін аэрозольді фазада болатын ^{99}Mo ($5,15 \cdot 10^{18}$ Бк) маңызды мәнге ие. ^{134}Cs мен ^{90}Sr активтілігі тиісінше $1,18 \cdot 10^{17}$ Бк және $1,06 \cdot 10^{17}$ Бк құрайды, бұл олардың ұзақ мерзімді сыртқы және ішкі сәулелену көздері ретіндегі маңыздылығын растайды.

Бір жылда пайда болған нуклидтердің массасы тіпті кішігірім массалар (мысалы, ^{99}Mo – жылына 0,29 кг) өте жоғары белсенділікпен қатар жүруі мүмкін екенін көрсетеді, бұл қатаң радиациялық бақылау қажеттігін көрсетеді. ^{90}Sr (20,29 кг/жыл) және ^{144}Ce (22,69 кг/жыл) сияқты массасы үлкен изотоптар да жоғары көші-қон қозғалысы және радиоуыттылыққа елеулі үлесі бар аэрозольдардың құрамына кіреді.

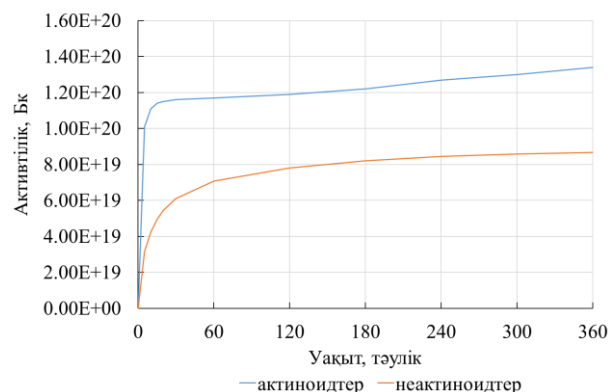
Зақымдалған твэлдерден ағып шыққан кезінде аэрозольдар шығарындылардағы ұзақ өмір сүретін радионуклидтердің жалпы белсенділігінің 10% -дан 80% -ға дейін құрауы мүмкін. Бұл деректер ПЯО уақытша сақтау қоймаларындағы сүзгіш жүйелерді, желдеткішті жобалау кезінде және қызметкерлер мен халықтың сәулеленуін бағалау кезінде аса маңызды. Отынды түсіргеннен кейін аэрозольдерді есептеу де бөгеттердің тұтастығы бұзылған кезде радионуклидтердің таралуын болжауға және радиоактивті қалдықтармен жұмыс істеу кезеңінде қорғау шараларын қалыптастыруға мүмкіндік береді [11].

4-кесте – Аэрозольдер

Нуклид	Белсенділігі, Бк	Массасы жылына, кг
^{89}Sr	$3,238 \cdot 10^{18}$	$3,012 \cdot 10^0$
^{90}Sr	$1,061 \cdot 10^{17}$	$2,029 \cdot 10^1$
^{95}Zr	$5,187 \cdot 10^{18}$	$6,522 \cdot 10^0$
^{99}Mo	$5,154 \cdot 10^{18}$	$2,901 \cdot 10^{-1}$
^{103}Ru	$4,033 \cdot 10^{18}$	$3,371 \cdot 10^0$
^{106}Ru	$6,623 \cdot 10^{17}$	$5,395 \cdot 10^0$
^{134}Cs	$1,182 \cdot 10^{17}$	$2,469 \cdot 10^0$
^{141}Ce	$4,958 \cdot 10^{18}$	$4,700 \cdot 10^0$
^{144}Ce	$2,673 \cdot 10^{18}$	$2,269 \cdot 10^1$

Жиынтық активтілікті есептеу. 5-суретте ұсынылған деректер реакторда отынның жылдық сәулелену процесінде неактиноидтар мен актиноидтардың радиоактивтілігінің өсуін көрсетеді. Бастапқы кезеңде (алғашқы 10 тәулік) белсенділіктің күрт артуы байқалады: неактиноидтар үшін $4,26 \cdot 10^{19}$ Бк дейін және актиноидтар үшін $1,11 \cdot 10^{20}$ Бк дейін, бұл қысқа мерзімдік бөліну өнімдері мен трансурандық элементтердің қарқынды жиналуымен байланысты. Одан әрі активтіліктің өсуі баяулайды, бірақ науқанның соңына дейін жалғасады: 360 тәулікке қарай неактиноидтардың белсенділігі $8,66 \cdot 10^{19}$ Бк, ал актиноидтар $1,34 \cdot 10^{20}$ Бк жетеді. Циклдің барлық кезеңінде актиноидтардың белсенділігі неактиноидтардың белсенділігінен асып түседі, бұл олардың үлкен меншікті радиоактивтілігіне және жануға төзімділігіне байланысты. Алынған нәтижелер радиациялық

қауіптілікті бағалау және ПЯО-мен жұмыс істеу жүйелерін жобалау кезінде изотоптар топтары бойынша да, уақыт бойынша да белсенділікті есепке алу қажеттілігін көрсетеді.



5-сурет – Уақыт бойынша активтіліктің өзгеруі

Жоғары активті бөліну өнімдері. 5-кестеде ұсынылған жоғары активті бөліну өнімдері ВВЭР-1000 реакторындағы отын циклы аяқталғаннан кейін пайдаланылған ядролық отынның радиациялық фонының едәуір бөлігін қалыптастырады. Бұл радионуклидтер салыстырмалы түрде аз массада да жоғары меншікті белсенділікпен сипатталады, бұл оларды қалдық жылу бөледі, радиациялық қорғауды және ПЯО қоймаларын жобалауды есептеудің маңызды объектілеріне айналдырады. Мұндай нуклидтер қатарына ^{91}Y , ^{95}Nb , ^{140}Ba , ^{143}Pr , ^{137}Cs және басқа изотоптар жатады [12]. Олардың кейбіреулері, ^{95}Nb және ^{140}La сияқты, $3,7 \cdot 10^{18}$ Бк -ден жоғары активтілікті көрсетеді, бұл түсірілгеннен кейінгі алғашқы айларда отынның қалдық радиациясында олардың үстем рөлін көрсетеді.

Кесте деректерін талдау ең жоғары активтілікті ^{140}La ($5,43 \cdot 10^{18}$ Бк) және ^{140}Ba ($5,33 \cdot 10^{18}$ Бк) көрсетінін көрсетеді, бұл олардың тез пайда болуымен және ыдырауының жоғары жылдамдығымен байланысты. ^{95}Nb ($5,17 \cdot 10^{18}$ Бк) және ^{120}Ce ($4,44 \cdot 10^{18}$ Бк), салыстырмалы түрде аз салмаққа қарамастан, олардың жоғары радиоуыттылығы мен энергетикалық маңыздылығын көрсете отырып, едәуір активтілікке ие. Активтілігі елеулі ^{137}Cs (41,12 кг) және ^{90}Sr (20,29 кг) неғұрлым жаппай изотоптар болып табылады, олар ағзада жинақталуға қабілетті болғандықтан, ұзақ жартылай ыдырау және биологиялық маңыздылығы бар.

Сонымен қатар, осы изотоптардың едәуір бөлігі биологиялық қауіп төндіреді – мысалы, ^{90}Sr мен ^{137}Cs адам ағзасында жинақталуға қабілетті, ал европий мен самарий изотоптарының нейтрондарды басып алудың жоғары қимасы бар, бұл отынның реактивтілігіне әсер етеді. Бұл нуклидтерді есепке алу қызметкерлерді радиациялық қорғауды қамтамасыз ету, қойманың конструкциялық материалдарын оңтайлы тандау, сондай-ақ жану үлгілерін калибрлеу және отынды пайдалану тереңдігін бағалау үшін қажет.

**ВВЭР-1000 РЕАКТОРЫНЫҢ ЖБҚ ІШІНДЕ БІРІНШІ ОТЫНДЫҚ ЦИКЛДАН КЕЙІНГІ
РАДИОНУКЛИДТЕРДІҢ ЖИНАЛУЫН ЕСЕПТЕУ**

5-кесте – Жоғары активті бөліну өнімдері

Нуклид	Активтілігі, Бк	Массасы жылына, кг
⁸⁶ Rb	2,961·10 ¹⁵	9,809·10 ⁻⁴
⁹⁰ Y	1,104·10 ¹⁷	5,486·10 ⁻³
⁹¹ Y	4,111·10 ¹⁸	4,530·10 ⁰
⁹⁵ Nb	5,165·10 ¹⁸	3,548·10 ⁰
¹⁰⁵ Ru	2,558·10 ¹⁸	1,028·10 ⁻²
¹⁰⁵ Rh	2,208·10 ¹⁸	7,064·10 ⁻²
¹¹¹ Ag	1,122·10 ¹⁷	1,920·10 ⁻²
¹²⁵ Sn	2,567·10 ¹⁶	6,399·10 ⁻³
¹²⁴ Sb	5,525·10 ¹⁴	8,531·10 ⁻⁴
¹²⁵ Sb	1,064·10 ¹⁶	2,742·10 ⁻¹
¹²⁶ Sb	1,998·10 ¹⁵	6,457·10 ⁻⁴
¹³⁶ Cs	6,360·10 ¹⁶	2,355·10 ⁻²
¹³⁷ Cs	1,325·10 ¹⁷	4,112·10 ¹
¹⁴⁰ Ba	5,335·10 ¹⁸	1,970·10 ⁰
¹⁴⁰ La	5,434·10 ¹⁸	2,642·10 ⁻¹
¹⁴³ Ce	4,440·10 ¹⁸	1,806·10 ⁻¹
¹⁴² Pr	8,839·10 ¹⁶	2,068·10 ⁻³
¹⁴³ Pr	4,566·10 ¹⁸	1,832·10 ⁰
¹⁴⁷ Nd	1,938·10 ¹⁸	6,471·10 ⁻¹
¹⁴⁷ Pm	3,253·10 ¹⁷	9,479·10 ⁰
¹⁴⁸ Pm	4,289·10 ¹⁷	7,049·10 ⁻²
¹⁴⁹ Pm	1,257·10 ¹⁸	8,566·10 ⁻²
¹⁵¹ Pm	5,020·10 ¹⁷	1,856·10 ⁻²
¹⁵³ Sm	8,495·10 ¹⁷	5,183·10 ⁻²
¹⁵⁴ Eu	5,446·10 ¹⁵	5,447·10 ⁻¹
¹⁵⁵ Eu	3,565·10 ¹⁵	1,955·10 ⁻¹
¹⁵⁶ Eu	2,681·10 ¹⁷	1,314·10 ⁻¹
¹⁵⁷ Eu	4,588·10 ¹⁶	9,429·10 ⁻⁴
¹⁶⁰ Tb	5,486·10 ¹⁴	1,313·10 ⁻³

Ақырында, осы нуклидтердің кейбіреулері, әсіресе сирек кездесетін элементтер (Nd, Pr, Sm), нейтронды-физикалық есептеулерді анықтау және верификациялау үшін маркерлер ретінде пайдаланылуы мүмкін. Осылайша, осы радионуклидтердің құрамын талдау және бақылау ядролық энергетикалық қондырғыларды қауіпсіз және тиімді пайдаланудың ажырамас бөлігі болып табылады.

ҚОРЫТЫНДЫЛАР

Бұл жұмыста ВВЭР-1000 реакторының активті аймағын нейтронды-физикалық модельдеу MCNP6 кодын пайдалану арқылы орындалды, отынның жануын есептеу және бірінші отын циклынан кейін радионуклидтердің пайда болуын талдау жүргізілді. Алынған нәтижелер модельдің жоғары сенімділігін көрсетеді: радионуклидтер массасының есептелген мәндерінің әдеби деректерден ауытқуы, бұл таңдалған модельдеу параметрлері мен қолданылған ядролық кітапханалардың дұрыстығын растайды.

Негізгі ұзақ өмір сүретін бөліну өнімдерінің ішінде жинақталудың ең жоғары мәндерін ¹³⁷Cs (41,12 кг), ⁹⁰Sr (20,29 кг) және ⁹⁹Tc (26,67 кг) изотоптары көрсетті, бұл оларды пайдаланылған ядролық

отынның радиоуыттылығын бағалау кезінде негізгі етеді. Актиноидтар арасында ең көп салмақ ²³⁹Pu (349,3 кг), ²⁴⁰Pu (75,05 кг) және ²⁴¹Pu (35,12 кг) байқалады, олар ПЯО-да плутоний компонентінің негізін құрайды және тұйық отын циклінде ықтимал пайдаланылуы мүмкін. Бұдан басқа, ұзақ мерзімді радиациялық бақылау үшін маңызы бар ²³⁷Np (9,67 кг) және ²³⁶U (162,4 кг) жинақталуы бойынша деректер алынды.

¹³⁴Xe (51,34 кг), ¹³²Xe (32,52 кг) және ¹³⁶Xe (80,13 кг) сияқты асыл газдар генерациясы желдету және герметизациялау жүйелерін жобалау кезінде, сондай-ақ твэл қабықтарының тұтастығын диагностикалау кезінде оларды есепке алу қажеттілігін растайды. Аэрозольді құрамдас бөлікті талдау жылына 39,91 кг ¹³³Cs, 22,69 кг ¹⁴⁴Ce және 20,29 кг ⁹⁰Sr пайда болатынын анықтады, бұл герметикалықтың бұзылуы кезіндегі шығарындылардағы белсенділіктің байқалатын деңгейіне сәйкес келеді.

ВВЭР-1000 реакторында радионуклидтердің жинақталуын модельдеу ПЯО-ның радиологиялық және технологиялық сипаттамаларын бағалауға, қалдықтармен жұмыс істеу жөніндегі шараларды негіздеуге және экологиялық тәуекелдерді азайтуға мүмкіндік береді. Осы жұмыстың нәтижелері Қазақстан Республикасындағы болашақ атом энергетикасы объектілерінде радиоактивті материалдарды сақтау, қайта өңдеу және көму жүйелерін жобалау кезінде пайдаланылуы мүмкін.

Жұмыс қатты радиоактивті қалдықтарды қайта өңдеу технологиясын (BR24993118) таңдау және іске асыру негіздемесі бойынша ФЭЖ жобасы шеңберінде орындалды.

ӘДЕБИЕТТЕР

1. MCNP6 Monte Carlo NeParticle Transport Code System, MCNP6.1, LANL, 2013.
2. ENDF/B-VII.0: next generation evaluated nuclear data library for nuclear science and technology. Nuclear Data Sheets (2006)
3. Sken, D.M.; Surayev, A.S.; Irkimbekov, R.A.; Vityuk, G.A.; Mukhamedov, N.Y.; Zhanbolatov, O.M.; and Vityuk, V.A. Development Of A Neutronic Model Of The Wwer-1000 Reactor Facility Core // Eurasian Journal of Physics and Functional Materials. – 2025. – Vol. 9, No. 2. – Art. 6. <https://doi.org/10.69912/2616-8537.1248>
4. In-core Fuel Management Code Package Validation for WWERs', IAEA-TECDOC-847, November 1995.
5. С.А. Андрушенко, ВВЭР-1000 үлгісіндегі реакторы бар АЭС. Пайдаланудың физикалық негіздерінен жобаның эволюциясына дейін С.А. Андрушенко, А.М. Афров, Б.Ю. Васильев, В.Н. Генералов, К.Б. Косоуров, Ю.М. Семченков, В.Ф. Украинцев. – М.: Логос, 2010. – 604 бет.
6. Lötsch T., Khalimonchuk V., Kuchin A. Proposal of a benchmark for core burnup calculations for a VVER-1000 reactor core. – 2009.

7. Bulbul Ahammed D. A. A. S. From VVER-1000 to VVER-1200: Studying the impact of core changes. – 2024.
 8. Б.Р. Бергельсон, С.А. Балюк. Ядролық энергетиканың U-Pu отын циклінде ұзақ өмір сүретін радиоуыттылықтың жинақталуын талдау // Атом энергиясы. – 1996. – 80. Т. – № 1. – 37–43 беттер.
 9. Ю.В. Чечеткин, Ю.В. Чечеткин, Е.К. Якшин, В.М. Ещеркин. – М.: Энергоатомиздат, 1986. – 152 бет.
 10. Е.И. Коптелов Радиметрия – ВМФ / Е.И. Коптелов, Г.И. Котивец. – 1972. – 535 бет.
 11. Ю.П. Ковбасенко, «Вестингауз» және «ТВЭЛ» компанияларының пайдаланылған отынның изотоптық құрамын салыстырмалы талдау. – 2016.
 12. Ю.А. Корчева және т.б. Беларусь АЭС пайдаланылған ядролық отынмен ұзақ уақыт жұмыс істеу кезінде негізгі радиациялық қауіпті радионуклидтердің номенклатурасы бойынша белсенділік қорларын бағалау // Беларусь Ұлттық ғылым академиясының жаңалықтары. Физика-техникалық ғылымдар сериясы. – 2020. – 65 Т. – № 2. – 243–251 бет.
<https://doi.org/10.29235/1561-8358-2020-65-2-243-251>
- REFERENCES**
1. MCNP6 Monte Carlo NeParticle Transport Code System, MCNP6.1, LANL, 2013.
 2. ENDF/B-VII.0: next generation evaluated nuclear data library for nuclear science and technology. Nuclear Data Sheets (2006)
 3. Seken, D.M.; Surayev, A.S.; Irkimbekov, R.A.; Vityuk, G.A.; Mukhamedov, N.Y.; Zhanbolatov, O.M.; and Vityuk, V.A. Development of a Neutronic Model of the WVER-1000 Reactor Facility Core // Eurasian Journal of Physics and Functional Materials. – 2025. – Vol. 9, No. 2. – Art. 6. <https://doi.org/10.69912/2616-8537.1248>
 4. In-core Fuel Management Code Package Validation for WWERs', IAEA-TECDOC-847, November 1995.
 5. Andrushenko, S.A., Afrov, A.M., Vasiliev, B.Yu., Generalov, V.N., Kosourov, K.B., Semchenkov, Yu.M., Ukrayintsev, V.F. NPPs with WVER-1000 Type Reactors: From the Physical Basics of Operation to Project Evolution. – Moscow: Logos, 2010. – 604 p (In Russ.).
 6. Lötsch T., Khalimonchuk V., Kuchin A. Proposal of a benchmark for core burnup calculations for a VVER-1000 reactor core. – 2009.
 7. Bulbul Ahammed D. A. A. S. From VVER-1000 to VVER-1200: Studying the impact of core changes. – 2024.
 8. Bergelson, B.R., Balyuk, S.A. Analysis of the Accumulation of Long-lived Radiotoxicity in the U–Pu Fuel Cycle of Nuclear Power // Atomic Energy. – 1996. – Vol. 80, No. 1. – P. 37–43 (In Russ.).
 9. Chechetkin, Yu.V., Yakshin, E.K., Eshcherkin, V.M. Treatment of Radioactive Gaseous Waste at NPPs. – Moscow: Energoatomizdat, 1986. – 152 p (In Russ.).
 10. Koptelov, E.I., Kotivets, G.I. Radiometry – Navy. – 1972. – 535 p (In Russ.).
 11. Kovbasenko, Yu.P. (2016). Comparative Analysis of the Isotopic Composition of Spent Nuclear Fuel of Westinghouse and TVEL Companies // Nuclear and Radiation Safety Journal (In Russ.).
 12. Korcheva, Yu.A. et al. Estimation of Activity Inventory for Major Radiologically Hazardous Radionuclides During Long-term Management of Spent Nuclear Fuel at Belarusian NPP // Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Series of Physical-Technical Sciences. – 2020. – Vol. 65, No. 2. – P. 243–251 (In Russ.).
<https://doi.org/10.29235/1561-8358-2020-65-2-243-251>

РАСЧЕТ НАКОПЛЕНИЯ РАДИОНУКЛИДОВ В ТВС РЕАКТОРА ВВЭР-1000 ПОСЛЕ ПЕРВОГО ТОПЛИВНОГО ЦИКЛА

Д. М. Секен*, А. С. Сураев, Н. Е. Мухамедов, Р. А. Иркимбеков, О. М. Жанболатов

Филиал «Институт атомной энергии» РГП НЯЦ РК, Курчатов, Казахстан

** E-mail для контактов: seken@nnc.kz*

В работе представлено нейтронно-физическое моделирование накопления радионуклидов в реакторе ВВЭР-1000 после первого топливного цикла с использованием кода MCNP6 и библиотек ENDF/B-VII. Проведены расчёты по образованию основных долгоживущих продуктов деления (^{90}Sr , ^{99}Tc , ^{137}Cs , ^{129}I и др.), актиноидов (Np, Pu, Am), благородных газов (Kr, Xe), а также аэрозольных и йодсодержащих радионуклидов. Особое внимание уделено оценке остаточной активности и влияния накопленных изотопов на радиационную безопасность. Исследование имеет прикладное значение для разработки стратегий обращения с ОЯТ и ТРО, проектирования хранилищ, оценки экологических рисков и развития атомной энергетики в Республике Казахстан.

Ключевые слова: *выгорание топлива, радионуклиды, актиноиды, отработанное ядерное топливо, твердые радиоактивные отходы, активность, радиационная безопасность, нейтронно-физические расчёты, MCNP.*

CALCULATION OF RADIONUCLIDE ACCUMULATION IN A VVER-1000 FUEL ASSEMBLY AFTER THE FIRST FUEL CYCLE

D. M. Seken^{*}, A. S. Surayev, N. E. Mukhamedov, R. A. Irkimbekov, O. M. Zhanbolatov

Branch "Institute of Atomic Energy" RSE NNC RK, Kurchatov, Kazakhstan

** E-mail for contacts: seken@nnc.kz*

This study presents neutron-physical modeling of radionuclide accumulation in a VVER-1000 reactor after the first fuel cycle using the MCNP6 code and the ENDF/B-VII nuclear data libraries. Calculations were performed to determine the generation of major long-lived fission products (^{90}Sr , ^{99}Tc , ^{137}Cs , ^{129}I , etc.), actinides (Np, Pu, Am), noble gases (Kr, Xe), as well as aerosol-forming and iodine-containing radionuclides. Special attention is given to the evaluation of residual activity, and the impact of accumulated isotopes on radiation safety. The findings are of practical importance for the development of spent nuclear fuel (SNF) management strategies, storage design, environmental risk assessment, and preparation for nuclear power plant construction in Kazakhstan.

Keywords: *fuel burnup, MCNP, radionuclides, actinides, spent nuclear fuel, activity, radiation safety, modeling, neutron-physical calculations.*

<https://doi.org/10.52676/1729-7885-2025-4-127-141>

УДК 544.6: 004.94: 620.9: 546.11: 538.9: 532.5

PHOTOELECTROCHEMICAL WATER SPLITTING SIMULATION: TOWARD A COMPREHENSIVE MODELING FRAMEWORK

N. Bakranov¹, B. Seitov², D. Bakranova^{3*}, E. Fattahi^{4,5}, A. Çoruh⁴, A. Niaei⁴

¹ Research Group altAir Nanolab LLP, Almaty, Kazakhstan

² Ahmet Yassawi University, Turkestan, Kazakhstan

³ SDU University, Faculty of Engineering & Natural Sciences, Kaskelen, Kazakhstan

⁴ Department of Physics, Faculty of Science, Sakarya University, Sakarya, Turkey

⁵ Department of Chemical Engineering, University of Tabriz, Tabriz, Iran

* E-mail for contacts: dinabakranova@gmail.com

This study presents a comprehensive computational framework that integrates physics-based modeling and data-driven approaches for analyzing and optimizing photoelectrochemical (PEC) water splitting systems. Utilizing COMSOL Multiphysics 6.1 and MATLAB, we simulate key electrochemical behaviors such as linear sweep voltammetry (LSV) and electrochemical impedance spectroscopy (EIS). COMSOL's multiphysics environment allows for the direct incorporation of electrolyte parameters, semiconductor photophysics, and current distribution, while MATLAB enables custom modeling of impedance behavior and predictive LSV analysis using artificial neural networks (ANNs). By coupling computational fluid dynamics (CFD), machine learning, and experimental validation, the proposed methodology provides an in-depth understanding of light-driven hydrogen generation on semiconductor electrodes such as ZnO/BiVO₄. Comparative analysis of simulation results shows that COMSOL and MATLAB produce consistent outputs, yet COMSOL demonstrates superior flexibility, accuracy, and ease of use, especially for systems influenced by variable physical and chemical conditions. The study further explores two-phase flow modeling, mesh independence testing, and the influence of gas bubbles on electrolyte conductivity. The findings contribute to the development of efficient, scalable PEC systems for clean hydrogen production and offer a foundation for future integration of hybrid simulation and AI techniques in renewable energy research.

Keywords: photoelectrochemical water splitting, COMSOL Multiphysics, MATLAB, electrochemical impedance spectroscopy, artificial neural networks, hydrogen production, electrochemical modeling.

INTRODUCTION

The excessive use of fossil fuels has made it urgent to develop renewable and sustainable energy sources to address the challenges associated with the energy crisis. In terms of direct solar energy conversion and storage, hydrogen has garnered significant attention due to its high energy density (120–142 MJ/kg) and the potential to obtain it from water. When used as an energy carrier, hydrogen is highly efficient. It can be employed for transportation, storage, and power generation in areas where other energy sources are difficult or costly to access. Additionally, the fact that its combustion produces only water vapor makes hydrogen particularly appealing as a clean energy solution [1].

Photoelectrochemical (PEC) water splitting systems are a promising and sustainable method for producing green hydrogen by harnessing solar energy. PEC systems utilize semiconductor photoelectrodes to convert solar light into chemical energy, leading to the decomposition of water into hydrogen and oxygen. This approach offers a carbon-free and environmentally friendly pathway to meet future energy demands.

The photoelectrochemical (PEC) system operates based on several key principles. First, a semiconductor photoelectrode absorbs sunlight, where photons with energy equal to or greater than the bandgap excite electrons from the valence band to the conduction band, forming

electron-hole pairs. These charge carriers must then be efficiently separated and transported: electrons typically migrate to the external circuit or the counter electrode, while holes remain in the photoelectrode. At the electrode–electrolyte interface, redox reactions occur – holes in the photoanode oxidize water molecules to produce oxygen gas, protons, and electrons. Meanwhile, the electrons travel to the cathode, where they reduce protons to form hydrogen gas. From an energetic perspective, the water-splitting reaction requires a minimum energy input of 1.23 eV; however, additional voltage, known as overpotential, is necessary to overcome kinetic barriers. For effective PEC operation, the band edges of the semiconductor must be appropriately aligned: the conduction band edge should lie at a more negative potential than the H⁺/H₂ reduction level, while the valence band edge should be more positive than the O₂/H₂O oxidation potential (Figure 1).

An essential consideration in the operation of a photoelectrochemical (PEC) cell is the necessity of employing a potentiostat-galvanostat system. Indeed, its use is required to optimize PEC water splitting performance. Illumination by sunlight or artificial light sources is used to excite the semiconductor photoanode, generating electron-hole pairs that facilitate the water-splitting reactions. In contrast, electrolysis performed solely with a potentiostat in the absence of illumination constitutes conven-

tional electrolysis, which generally demands higher electrical energy input. The integration of solar illumination with an applied external bias significantly lowers the total electrical energy required, thus improving the overall energy efficiency and sustainability of the process. Unlike traditional electrolysis, which depends entirely on electrical power, PEC systems leverage both photonic and electrical inputs, enabling lower operational voltages. While solar energy or lamp-based illumination primarily drives the photoelectrode activity, the application of an external potential – commonly controlled via a potentiostat – remains essential in both experimental and practical PEC water splitting to enhance charge separation, reaction kinetics, and hydrogen evolution efficiency [3, 4].

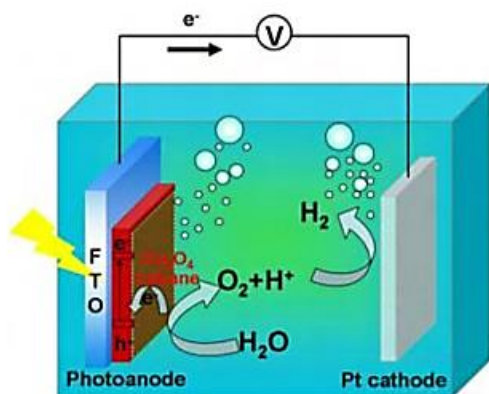


Figure 1. Schematic of a PEC system [2]

In recent years, various semiconductors such as TiO_2 , ZnO , SiC , $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$, WO_3 , and BiVO_4 have been proposed and extensively studied as photoanodes. Their wide application is attributed to a combination of availability, high stability, and environmental safety. Among these materials, BiVO_4 has attracted particular attention due to its relatively narrow band gap (~ 2.4 eV), which enables efficient light absorption and photogeneration of charge carriers [5]. BiVO_4 is an n-type semiconductor with a band gap of 2.4 eV and can serve as a non-toxic photoanode active in the visible range. The favorable alignment of its band edges with the redox potentials of water makes BiVO_4 a promising candidate not only for PEC water splitting (Figure 2) but also for CO_2 reduction systems. The theoretical solar-to-hydrogen (STH) efficiency of BiVO_4 reaches 9.1%, creating strong expectations for its future commercialization [6]. However, the performance of BiVO_4 -based photoanodes remains limited by the sluggish kinetics of the oxygen evolution reaction (OER). This limitation is caused by the high kinetic barrier of water oxidation and severe surface recombination of charge carriers due to their poor mobility [7]. As a result, the photocurrent density of BiVO_4 -based systems rarely approaches the theoretical maximum of $7.5 \text{ mA} \cdot \text{cm}^{-2}$ at 1.23 V vs RHE.

To enhance activity, various strategies have been explored, including controlled growth of specific crystallographic facets, defect engineering, formation of oxygen

vacancies, and doping with metals or non-metals to tune the electronic properties of BiVO_4 . Considerable attention has been given to the development of highly active OER catalysts and interface engineering between the catalyst and BiVO_4 [8]. For example, the introduction of a hole transport layer can suppress interfacial recombination and improve system efficiency. Notably, the incorporation of Co_3O_4 nanoparticles between NiOOH and BiVO_4 results in the $\text{NiOOH}/\text{Co}_3\text{O}_4/\text{BiVO}_4$ photoanode, which delivers a photocurrent density of $6.4 \text{ mA} \cdot \text{cm}^{-2}$ at 1.23 V vs RHE with stability up to 90 h. The formation of p–n junctions with Co_3O_4 promotes efficient hole extraction and accelerates water oxidation, enabling charge separation efficiencies of 95.6% and charge transfer efficiencies of 97.7% [9]. Similarly, Fang et al. demonstrated that the deposition of NiFeOOH and Co-Pi cocatalysts increases the photocurrent to $2.03 \text{ mA} \cdot \text{cm}^{-2}$ at 1.23 V vs RHE, which is 5.8 times higher than that of pristine BiVO_4 [10].

Another promising approach to improving the photoelectrochemical activity of BiVO_4 is the construction of heterostructures. In $\text{Ag-Pi}/\text{BiVO}_4$ systems, the built-in electric field greatly accelerates hole transport and charge separation, while $\text{WO}_3/\text{BiVO}_4$ core-shell heterostructures compensate for the low carrier mobility of BiVO_4 and significantly enhance PEC performance.

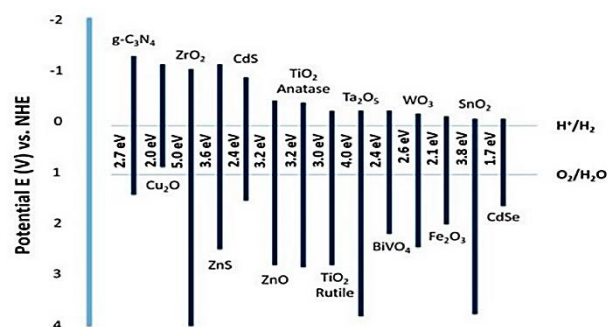


Figure 2. Band edge positions of typical semiconductors used for water splitting. Reproduced from [11] with permission from MDPI

Thus, the integration of semiconductors into heterostructures can mitigate the limitations of individual components and improve overall efficiency [12]. For instance, in the multilayer $\text{WO}_3/\text{BiVO}_4/\text{TiO}_2$ photoelectrode, BiVO_4 acts as the light absorber, TiO_2 serves as a protective layer against photocorrosion, and WO_3 functions as the conductive layer [13]. Since charge separation and transport directly determine the concentration of holes participating in oxidation reactions, the introduction of semiconductor layers onto BiVO_4 not only enhances light absorption but also forms heterojunctions that facilitate charge separation [14].

Beyond heterostructures, increasing attention has also been directed toward BiVO_4 homostructures formed by combining different crystalline forms of the same material. In particular, the combination of monocrystalline and polycrystalline BiVO_4 allows one to merge the

advantages of high carrier mobility in the single crystal with the large active surface area and facile synthesis of the polycrystal. Monocrystalline BiVO_4 exhibits much higher electron conductivity ($12 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$) and fewer grain boundaries, thereby reducing carrier recombination. However, single crystals suffer from limited active surface area and complex synthesis, which restricts their practical use. Thus, homostructures that combine monocrystalline and polycrystalline phases can minimize carrier losses while simultaneously increasing the number of active reaction centers. This approach offers new opportunities for improving both the stability and efficiency of PEC processes, making BiVO_4 -based homostructures a highly promising direction for further optimization [15].

Overall, among the various semiconductor photoanodes investigated, BiVO_4 stands out as one of the most promising due to its narrow band gap, favorable band edge positions, and high theoretical STH efficiency. At the same time, its intrinsic drawbacks-low electron mobility, surface recombination, and slow water oxidation kinetics-make BiVO_4 a model system for the development and testing of advanced PEC enhancement strategies. In particular, the design of hetero- and homostructures, the application of cocatalysts, passivation layers, and interface engineering allow for a deeper understanding of charge transfer mechanisms and reveal universal principles for optimizing photoanode performance. These factors explain the choice of BiVO_4 as the central focus of the present study, aimed at identifying and systematizing approaches to improve its activity and stability, while building a foundation for the future commercialization of PEC technologies. These findings are in good agreement with recent reports on rhodium-modified perovskite oxides for enhanced OER activity [16].

MODELING AND SIMULATION PEC SYSTEM

Electroanalysis is a scientific study focused on the quantitative measurement of the composition or properties of chemical systems using electrochemical techniques. Common electroanalytical methods include cyclic voltammetry, linear sweep voltammetry, chronopotentiometry, and electrochemical impedance spectroscopy. These experiments can be performed in either static electrolyte solutions or in solutions that are subjected to forced fluid flow.

The primary objectives of electroanalytical modeling in COMSOL Multiphysics include the determination of both kinetic and thermodynamic parameters associated with electrochemical reactions occurring at electrode surfaces. These simulations provide insights into the fundamental behavior of the electrochemical interface under various conditions. Additionally, electroanalysis allows for the characterization of mass transport properties, facilitating the study of how electroactive species diffuse, migrate, or convect within the electrolyte. Furthermore, COMSOL enables the exploration of reaction mechanisms, offering a detailed understanding of the electrochemical pathways and the subsequent chemical reactivity of the species formed during these processes [17].

Using CFD offers enhanced accessibility and the opportunity to explore complex systems that may be challenging to assess experimentally. Recognizing these benefits, it is crucial to focus on developing CFD simulation approaches for PEC cells. Machine learning methodologies, including artificial neural networks (ANN), have the potential to enhance predictive accuracy and optimize the operational efficacy of alkaline water splitting by utilizing data-driven insights.

COMSOL Multiphysics offers distinct advantages over MATLAB in the field of electrochemical modeling, primarily due to its native support for coupled multiphysics simulations. Unlike MATLAB, where individual governing equations such as Nernst–Planck (ion transport), Navier–Stokes (fluid dynamics), Poisson (electrical potential), and Butler–Volmer (electrode kinetics) must be implemented separately and manually coupled, COMSOL provides an integrated environment that solves these equations simultaneously within a unified framework [18, 19]. The graphical user interface in COMSOL further facilitates the construction of complex geometries – such as porous electrodes or microfluidic channels – and automatically generates high-quality finite element meshes, eliminating the need for manual scripting or external meshing tools often required in MATLAB. Additionally, COMSOL includes a built-in, robust finite element solver with automatic mesh refinement and convergence control, whereas MATLAB users must assemble system matrices, impose boundary conditions, and ensure numerical stability manually unless employing specialized toolboxes. Widely recognized in both academia and industry, COMSOL has become the standard platform for solving coupled multiphysics problems, supported by extensive validation studies. While MATLAB remains a powerful tool for algorithm development, data analysis, and simplified one-dimensional models, it lacks out-of-the-box capabilities for full-scale, three-dimensional multiphysics simulations.

In modeling the LSV curve using MATLAB coding, we define the Tafel or Butler–Volmer equation. However, in COMSOL, in addition to that information, we also need the concentration of the electrolyte and its conductivity, which are influential parameters in electrochemistry, especially in LSV curves. The COMSOL software is more comprehensive and includes all relevant details, whereas, in MATLAB, this is not the case. Another consideration is that when using ANN in the electrochemistry field, especially when training a LSV curve, a substantial amount of data is required. The more databases are applied in ANN modeling, the more accurate the network will be, and consequently, it will be able to predict other circumstances. In contrast, with the limited experimental data available, we will be able to train it and use it for predictions in COMSOL.

Experimental Studies on ZnO/BiVO_4 -based PEC Water Splitting Systems are summarized in Table 1.

Simulation and modeling studies in PEC water splitting are further summarized in Table 2.

PHOTOELECTROCHEMICAL WATER SPLITTING SIMULATION: TOWARD A COMPREHENSIVE MODELING FRAMEWORK

Table 1. Experimental Studies on ZnO/BiVO₄ -based PEC Water Splitting Systems

No	Electrodes Used	PEC Performance	Ref.
1	Photoanode: ZnO/BiVO ₄ on ITO Counter: Pt Ref: Ag/AgCl	J = 1.72 mA/cm ² @ 1.2 V vs Ag/AgCl	[20]
2	Photoanode: a thin film of BiFeO ₃ nanosheets on FTO Counter: Pt Ref: Ag/AgCl	0.56 μ A cm ⁻² under continuous light illumination, and 0.07 μ A cm ⁻² in the absence of light.	[21]
3	Photoanode: ZnO/BiVO ₄ /Co-Pi Counter: Pt	Onset = 0.09 V _{RHE} ; J = 3.4 mA/cm ² @ 0.6 V _{RHE}	[22]
4	Photoanode: ZnO/BiVO ₄ /NiFePB Counter: Pt	J = 1.66 mA/cm ² @ 1.23 V _{RHE}	[23]
5	Photoanode: WO ₃ /BiVO ₄ /Co-Pi; Counter: Pt	J = 6.7 mA/cm ² @ 1.23 V _{RHE}	[24]
6	Photoanode: BiVO ₄ ; Counter: Pt	solar-to-hydrogen (STH) efficiency is around 5% for single BiVO ₄ photoanodes and >8% for tandem systems.	[25]
7	Photoanode: BiVO ₄ /FeOOH Counter: Pt	J $\approx$ 1 mA/cm ² @ 0.6 V _{RHE}	[26]
8	Photoanode: ZnO/BiVO ₄ Counter: Pt	The Co-Pi/BiVO ₄ /ZnO nano dendrite array photoanode achieved 3.5 mAcm ⁻² at 1.23 V vs. RHE, demonstrating improved performance compared to bare BiVO ₄ .	[27]
9	Photoanode: BiVO ₄ /Mo Counter: Pt	STH up to ~3% in prototype	[28]
11	Photoanode: BiVO ₄ / NiFeO _x Counter: Pt	The hydrogenated BiVO ₄ photoanodes, when coupled with a NiFeO _x cocatalyst, achieve a high efficiency of 1.91% at 0.58 V vs RHE.	[29]
13	Photoanode: BiVO ₄ ; Counter: Pt		[30]

Table 2. Simulation and modeling studies on PEC water splitting system

No	Modeling/simulation Method	Software	Key results	Ref.
1	ANN prediction	MATLAB + ANN	Photocurrent prediction and system tuning	[31]
2	Carrier transport modeling	COMSOL	Charge separation efficiency	[32]
3	Nemst–Planck & Butler–Volmer equation	COMSOL	Design validation- Improved solar-to-hydrogen conversion efficiency	[33]
4	FEM ion transport	-	Potential and current distribution	[34]
5	Modeling of charge transfer	MATLAB	Photo absorber J–V, mass + charge transport	[35]
6	light absorption and charge separation	COMSOL	photocatalytic performance	[36]
7	Electrochemical kinetics at electrode/electrolyte interface	COMSOL	Overpotentials and catalytic activity	[37]

The present study aims to establish a comprehensive modeling and simulation framework for photoelectrochemical (PEC) water splitting systems, with a focus on analyzing and optimizing their electrochemical performance. Two primary simulation platforms are employed in this work: COMSOL Multiphysics 6.1 and MATLAB. COMSOL is utilized to perform linear sweep voltammetry (LSV) simulations under varying operational conditions to evaluate the photoelectrode activity, as well as electrochemical impedance spectroscopy (EIS) analyses to investigate charge-transfer mechanisms and interfacial properties. In parallel, MATLAB is used to implement artificial neural networks (ANNs) for predicting LSV behavior, allowing a comparative evaluation of ANN predictions against COMSOL-based results. Additionally, MATLAB-based custom code is developed for modeling impedance spectra, providing an alternative route to validate and interpret electrochemical data. By integrating physics-based simulations with data-driven approaches, the study seeks to gain deeper insight into PEC system

behavior, assess the accuracy and reliability of different modeling techniques, and support future experimental validation.

Ultimately, this integrated approach enhances the understanding of PEC hydrogen production systems and contributes to the development of efficient and scalable clean energy technologies.

As mentioned earlier, at the beginning of the project, we also modeled impedance in both software to compare their accuracy. After that, we used the Tafel equation to model the kinetics of electrochemical reactions in both software to highlight the software of COMSOL and its superiority in application. In the following, the process of coupling the neural network and COMSOL with the electrolysis of water with graphite electrodes was also carried out.

METHODOLOGY

Methodology for Simulating Impedance of Randles Circuit:

In MATLAB:

- 1) Define circuit parameters: R_s (solution resistance), R_{ct} (charge transfer resistance), C_{dl} (double-layer capacitance), ω (angular frequency $2\pi f$), j (imaginary unit $\sqrt{-1}$).
- 2) Generate logarithmic frequency vector
- 3) Calculate total impedance using the modeled Randles model formula (1).
- 4) Plot Nyquist diagram (real vs. imaginary impedance)

$$z(\omega) = R_s + \frac{1}{\left(\frac{1}{R_{ct}} + j\omega C_{dl} \right)} \quad (1)$$

In COMSOL Multiphysics:

EIS was simulated using the Electroanalysis physics interface in COMSOL Multiphysics. A small sinusoidal perturbation was applied to the working electrode potential, and the resulting current response was recorded. The impedance was calculated over a logarithmic frequency range. Material properties, electrode kinetics (via the Butler–Volmer equation), and double-layer capacitance were defined based on literature values. The Nyquist plot was then generated using the simulation results.

Methodology of modeling Tafel equation in MATLAB and COMSOL:

In the MATLAB section, we will define the Tafel equation using code. For comparison with COMSOL software, we will select the secondary current distribution physics and choose the electrode reaction equation known as the Tafel equation.

Methodology for Coupling COMSOL and ANN:

Figure 3 depicts the modeling procedures suggested in this study. The initial phase involved CFD simulation, encompassing the precise design of the system's geometry, the modeling of the electrochemical and momentum sections, and the meshing process. Following validation of the outcomes to confirm their accuracy, the subsequent step involved creating a dataset derived from the simulation results that reflected the influence of operational parameters, such as temperature and electrolyte concentration. This dataset was then imported into the neural network toolbox within MATLAB.

An ANN was employed to model and predict the current density (J) based on three input parameters: potential (V), temperature (T), and concentration (C). MATLAB was used as the computational platform to implement, train, and validate the ANN. ANN generally consists of three main layers: input, hidden, and output. In Figure 4, the ANN developed in this study is illustrated, showcasing layers of interconnected neurons. The outputs are derived from computations executed by the neurons from the preceding layer. The ANN modeling process consists

of testing, training, and validation. Unlike other training algorithms, the Levenberg–Marquardt training algorithm demonstrated superior performance, leading to its selection for training this ANN model. The 2008 datasets generated by CFD modeling in COMSOL Multiphysics were classified into three distinct categories, namely, 70% for training (1406 datasets), 15% for testing (301 datasets), and 15% reserved for validation (301 datasets). They were exported to MATLAB for the development of the ANN model.

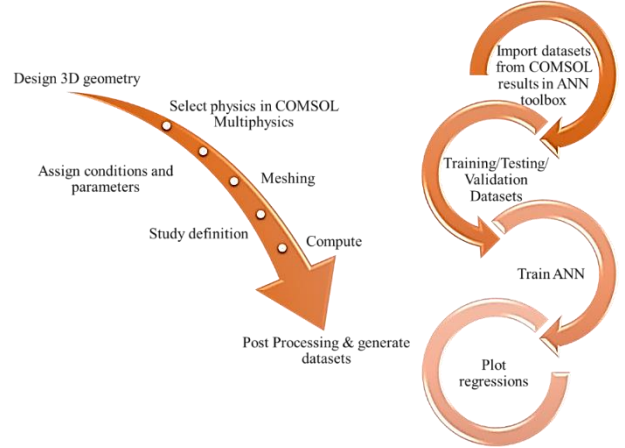


Figure 3. The sequence of executing the steps of the suggested modeling in methodology

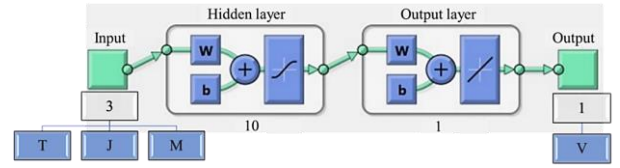


Figure 4. Schematic representation of the proposed artificial neural network

The accuracy of the COMSOL simulation against experimental data was evaluated by calculating the coefficient of determination (R^2), as illustrated in equation (2) [38]:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_{i,\text{exp}} - y_{i,\text{CFD}})^2}{\sum_{i=1}^n (y_{i,\text{exp}} - \bar{y}_{i,\text{exp}})^2} \quad (2)$$

Ion conductivity in electrolytes adheres to Ohm's law (3) and (4), which states that the electric current flowing through a conductor is directly related to the voltage difference between its terminals [39]. The electrolyte's conductivity is ascertained through equation (5). Equation (6) modifies the electrical conductivity of the electrolyte by accounting for the bubbles generated at the electrodes. These bubbles act like resistance and reduce the conductivity of the electrolyte [40, 41]. The Tafel equation (a simplified version of the Butler–Volmer equation due to overpotentials exceeding 100 mV of electrodes [42]) models the current density at the electrode surfaces, as outlined in equation (7) [43]. The energy efficiency of the

cell was calculated using the higher heating value (HHV) of hydrogen, referencing the thermoneutral voltage of 1.48 V, as presented in equation (8) [44–46]. Ultimately, the standard potential, U_{sm} , of the two-electrode cell is calculated through (9) as an operating temperature-dependent variable.

$$\nabla \cdot J = Q \rightarrow J = -\sigma \nabla \phi, \quad (3)$$

$$\nabla \cdot i = Q_j, \quad (4)$$

$$\sigma_0 = -204.1M - 0.28M^2 + 0.5332MT + 20720 \frac{M}{T} + 0.1043M^3 - 0.00003M^2T^2, \quad (5)$$

$$\sigma_{real} = \sigma_0 (1 - \varepsilon)^{1.5}, \quad (6)$$

$$\eta = b \cdot \log \left(\frac{J}{J_0} \right), \quad (7)$$

$$\eta = \frac{1.48}{\phi}, \quad (8)$$

$$U_{sm} = 1.5184 - 1.5421 \cdot 10^{-3} \cdot T + 9.523 \cdot 10^{-5} \cdot T \cdot \ln T + 9.84 \cdot 10^{-8} \cdot T^2. \quad (9)$$

In this system, it was observed that the bubbles generated on the electrode surface do not detach from it. Therefore, the effect of gas generation was effectively accounted for as a decrease in electrolyte conductivity. These adherent gas bubbles preserve the electrolyte's single-phase status. Nevertheless, we employed the Euler-Euler Model and Laminar Flow physics to investigate the dispersed phase of the produced bubbles within a two-phase system. The results showed that the volume fraction of the bubbles is zero (data will be provided in the next part). Given the certainty of the system's single-phase nature, as confirmed by experimental observations and computational results, we model the system under this condition.

The electrolyte phase is considered a Creeping Flow due to its complete immobility. The modified Navier-Stokes and continuity equations characterize the dynamics of velocity and pressure within the electrolyte phase [47]. The inertial term (Stokes flow) was neglected as a modification of the Navier-Stokes equation (10) and (11). Table 1 lists the parameters used to model the 3D two-electrode AWE setup.

$$0 = -\nabla P + \rho g + \nabla K, \quad (10)$$

$$\rho \nabla \cdot V = 0. \quad (11)$$

The physics of secondary current distribution and creeping flow were selected in the COMSOL Multiphysics® software along with a steady-state study, for modeling.

Figure 5 illustrates the geometrical configuration developed for the system using COMSOL Multiphysics 6.1® software. This geometric design was derived from the experimental setup employed to assess the GR

performance and confirm the accuracy of the simulation findings.

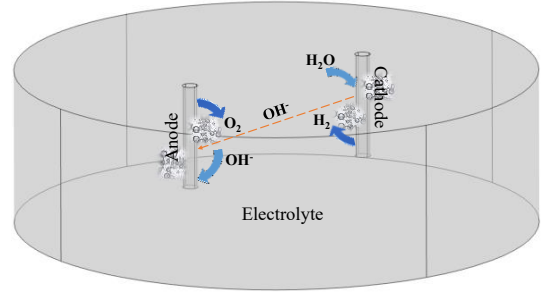


Figure 5. The system geometry in COMSOL Multiphysics® software.

Two phase flow modeling

The Euler-Euler model was used to model two-phase flow. Firstly, the model calculates the volume fraction of the continuous and the dispersed phases using the continuity equation, as shown in equations (12) and (13) [39]:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_c \phi_c) + \nabla \cdot (\rho_c \phi_c u_c) = m_{dc}, \quad (12)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_d \phi_d) + \nabla \cdot (\rho_d \phi_d u_d) = -m_{dc}, \quad (13)$$

where ϕ shows the volume fraction of each phase (dimensionless), u is the velocity (m/s), ρ is the density (kg/m³), and m_{dc} is the mass transfer rate from the dispersed to the continuous phase (kg/(s·m³)). The subscripts c and d represent the continuous and dispersed phases, respectively.

Equation (14) describes the relationship between the volume components of two phases. The continuity equation for the mixture is given by (15) [39].

$$\phi_c = 1 - \phi_d, \quad (14)$$

$$\nabla \cdot (\phi_d u_d + u_c (1 - \phi_d)) = m_{dc} \left(\frac{1}{\rho_c} - \frac{1}{\rho_d} \right). \quad (15)$$

The momentum balance equation for the continuous phase and dispersed phase is expressed as follows [39]:

$$\begin{aligned} \rho_c \phi_c \left[\frac{\partial}{\partial t}(u_c) + u_c \nabla \cdot (u_c) \right] &= -\phi_c \nabla P + \phi_c \nabla \cdot \tau_c + \\ &+ \phi_c \rho_c g + F_{m,c} + \phi_c F_c + m_{dc} (u_{int} - u_c), \\ \rho_d \phi_d \left[\frac{\partial}{\partial t}(u_d) + u_d \nabla \cdot (u_d) \right] &= -\phi_d \nabla P + \phi_d \nabla \cdot \tau_d + \\ &+ \phi_d \rho_d g + F_{m,d} + \phi_d F_d - m_{dc} (u_{int} - u_d), \end{aligned} \quad (16)$$

in which, P – represents the pressure of the mixture (Pa), g – denotes gravitational acceleration (m/s²), u_{int} – signifies interphase velocity (m/s), τ – is the viscous stress tensor (Pa), $-F_m$ indicates interphase momentum transfer (N/m³), and F refers to any other volume force (N/m³).

In multiphase flow systems, the drag force is considered the most important interphase force [48], and the following equation is used to calculate it [39]:

$$F_{m,c} = -F_{m,d} = \frac{3}{4d_d} \phi_c \phi_d C_D \rho_c |u_{slip}| u_{slip}. \quad (18)$$

In (18), d_d represents the diameter of the dispersed particles (m), and C_D is the drag coefficient. Slip velocity is defined as:

$$u_{slip} = u_d - u_c. \quad (19)$$

C_D is calculated using the Schiller-Naumann relation (20). The particle Reynolds number, Re_p , is determined using (21) [39]:

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{Re_p} (1 + 0.15 Re_p^{0.687}) & Re_p < 1000 \\ 0.44 & Re_p \geq 1000 \end{cases} \quad (20)$$

$$Re_p = \frac{d_d \rho_c |u_{slip}|}{\mu_c}. \quad (21)$$

Bubble dispersion is included in the momentum equation using a volume force according to [49]:

$$F_{BD} = -\phi_d \rho_c \frac{K_g}{d_d} |u_{slip}| \nabla \phi_d, \quad (22)$$

where K_g/d_d is the gas-phase dispersion factor, which is 5 m/s for oxygen and 2.5 m/s for hydrogen.

The viscous stress tensors are calculated according to the following relations [50]:

$$\tau_c = \mu_c \left(\nabla u_c + (\nabla u_c)^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot u_c) I \right), \quad (23)$$

$$\tau_d = \mu_d \left(\nabla u_d + (\nabla u_d)^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot u_d) I \right). \quad (24)$$

Lastly, the Faradaic equation calculates the amount of hydrogen and oxygen gas produced ($\text{g}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$) by the reaction on the electrode surface, as a function of the electrode's current density (25) and (26). To calculate the total amount of gas in each of the cathode and anode chambers, the amount of water vapor was taken into account (27–30) [39–51]:

$$m_{H_2} = \frac{M_{H_2}}{2F} \cdot i, \quad (25)$$

$$m_{O_2} = \frac{M_{O_2}}{4F} \cdot i, \quad (26)$$

$$P_{vapor} = 0.61121 \cdot \exp \left[\left(18.678 - \frac{T - 0[\text{deg C}]}{234.5[K]} \right) \cdot \left(\frac{T - 0[\text{deg C}]}{257.14 + T - 0[\text{deg C}]} \right) \right], \quad (27)$$

$$x_{H_2O} = \frac{P_{vapor}}{p}, \quad (28)$$

$$m_{vap,cathode} = \frac{M_{H_2O}}{2F} \cdot i \cdot \frac{x_{H_2O}}{1 - x_{H_2O}}, \quad (29)$$

$$m_{vap,anode} = \frac{M_{H_2O}}{4F} \cdot i \cdot \frac{x_{H_2O}}{1 - x_{H_2O}}, \quad (30)$$

where M_{H_2} , M_{H_2O} , and M_{O_2} are the molecular weights of hydrogen, water, and oxygen. P_{vapor} is the water vapor pressure, P is the operating pressure, which is standard pressure (1 atm), T is the operating temperature in °C, and x_{H_2O} is the mole fraction of water vapor in the gas phase.

PEC water splitting simulation

PEC water splitting systems rely on the interplay between photogenerated charge carriers and electrochemical redox reactions at the semiconductor–electrolyte interface. In contrast to conventional water electrolysis, which requires a minimum thermodynamic potential of 1.23 V under standard conditions, PEC systems can achieve water splitting at significantly lower applied voltages. This is because incident photons excite electrons from the valence band to the conduction band of a semiconductor, generating electron-hole pairs that contribute part of the Gibbs free energy required for water splitting. As a result, the external bias needed to drive the redox reactions is reduced, effectively lowering the onset potential of the system. This photovoltage, generated internally by the light-absorbing semiconductor, plays a crucial role in enabling spontaneous or low-bias-driven water splitting reactions. Therefore, light not only activates the semiconductor but also alters the electrochemical potential landscape at the interface, tightly coupling photo- and electrochemical processes.

In this simulation, we employ a hybrid modeling approach to capture both the photophysical behavior of the semiconductor photoelectrode and the electrochemical reactions at the semiconductor–electrolyte interface. The model combines two physics interfaces in COMSOL Multiphysics: Semiconductor (under illumination) and Secondary Current Distribution.

First, semiconductor physics is used to simulate light absorption and carrier transport within the photoelectrode. Generation of electron-hole pairs due to incident light is defined through an optical generation term, and the internal electric potential is computed by solving the coupled Poisson and drift-diffusion equations. The resulting electrostatic potential at the interface between the semiconductor and electrolyte represents the photovoltage developed due to illumination.

Next, this photovoltage is used as an input into the Secondary Current Distribution interface to model the electrochemical kinetics. The potential difference between the semiconductor surface and the reversible water-splitting potential (1.23 V vs. RHE) is used to define the local overpotential driving the reaction. The Butler-Volmer equation is applied at the interface to describe the

charge transfer between the photoelectrode and the electrolyte.

This approach allows for the analysis of how illumination affects the onset potential and current density in PEC water splitting, effectively linking the semiconductor's photogenerated potential to the electrochemical performance of the system.

RESULTS

Comparison of EIS outcomes acquired from two mathematical approaches

At the beginning of the results section, we attempted to model the Nyquist plot using both COMSOL and MATLAB. In MATLAB, we wrote code to obtain the results, while in COMSOL, we used the Electroanalysis physics module. Figure 6 presents the EIS results for a pre-prepared sample from the experimental setup, COMSOL simulation, and MATLAB modeling. As shown, MATLAB and COMSOL demonstrate similar capabilities in predicting the Nyquist plot of the sample. Compared to the experimental data, both simulations exhibit some deviation and are not entirely accurate. Nevertheless, our primary focus is on the similarity in their prediction abilities. COMSOL, with its user-friendly interface and predefined equations, provides a comparable level of accuracy to MATLAB, which requires more extensive coding efforts.

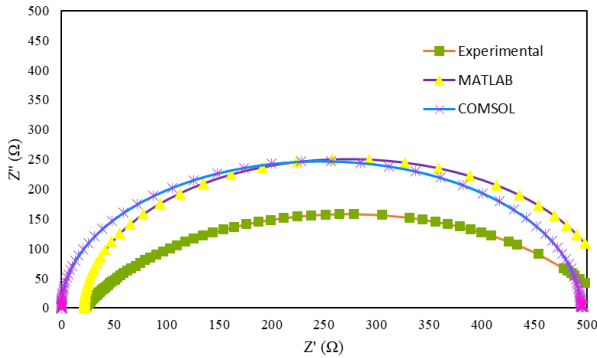


Figure 6. Nyquist plot obtained from experimental test, COSMOL simulation, and MATLAB modeling

This code was developed to simulate the impedance behavior of a water electrolysis system. experimental impedance curve presented in Figure 6 was obtained from one of our synthesized perovskite oxides (LaFeO_3) under dark water electrolysis conditions. This data was utilized exclusively for extracting the electrochemical parameters listed in Table 3 and for validating the numerical implementation of the COMSOL–MATLAB model ensuring accurate representation of the electrochemical behavior in the simulations. Under illumination, the charge transfer resistance (R_{ct}) decreases due to increased generation of charge carriers and enhanced electrochemical reaction rates. Therefore, for a PEC cell, we simply replace the R_{ct} value with the new, illumination-dependent value to account for the effect of light on the system's impedance.

In photoelectrochemical (PEC) water splitting, illumination plays a critical role in determining the electro-

chemical behavior of the system. Two important parameters used to characterize this effect are the light sensitivity coefficient (k) and the normalized light intensity (I). The light sensitivity coefficient is a dimensionless quantity that reflects the extent to which the electrochemical response of the PEC cell varies with changes in illumination. Higher values of k indicate greater sensitivity to light intensity fluctuations. The normalized light intensity I represents the ratio of the applied light intensity to a standard reference, typically taken as the AM 1.5G solar spectrum at 1000 W/m^2 . This normalization allows for consistent comparison of PEC performance under different experimental or simulated lighting conditions, using a scale ranging from 0 (complete darkness) to 1 (standard full illumination). Despite the utility of these parameters, a universally applicable equation describing the precise dependence of electrochemical behavior on k and I has yet to be established, due to the complexity and variability of PEC systems.

However, in practice, especially for systems with a fixed and well-defined light source (such as ours), these settings are unnecessary. Because the light intensity remains constant throughout testing, there is no need to model variations in lighting. The impedance modeling including the equivalent circuit and governing equations, in PEC water splitting compared to water electrolysis, is intact. The sole modification being the illumination-adjusted values of electrochemical parameters. The only thing that changes is the charge transfer resistance R_{ct} , which is determined by the system under certain lighting circumstances. Thus, there is no need to include or change k , I , or the corresponding equations during simulations. This method simplifies modeling while properly describing the system's behavior under constant light.

Table 3 provides the details of the parameters inserted into MATLAB and COMSOL software to obtain the Nyquist plot.

Table 3. The details of the parameters inserted into MATLAB and COMSOL software

Parameter	Symbol	Unit	Value
Solution Resistance	R_s	Ω	21.77
Charge Transfer Resistance	R_{ct}	Ω	501.1
Double-Layer Capacitance	C_{dl}	F	$6.3 \cdot 10^{-4}$
High frequency	f_{max}	Hz	100000
Low frequency	f_{min}	Hz	0.01

Comparing LSV curves obtained from coding in MATLAB and simulation through COMSOL

It is evident from the results in Figure 7 that both mathematical approaches – COMSOL simulation and MATLAB coding – yield nearly identical results. Nonetheless, a significant differentiation emerges when scrutinizing the influence of electrolyte concentration on electrocatalytic efficacy. While MATLAB coding, which is based on the classical Tafel equation, does not incorporate an explicit parameter for electrolyte concentration, COMSOL facilitates the direct integration of electrolyte

concentration as an input variable that significantly affects the LSV characteristics. The classical Tafel equation does not explicitly account for electrolyte concentration as a variable; hence, its impact can only be integrated empirically through MATLAB by adjusting the exchange current density J_0 , which necessitates extensive and dependable experimental data. This constraint diminishes the model's precision and increases reliance on numerous experiments to calibrate the parameters accurately.

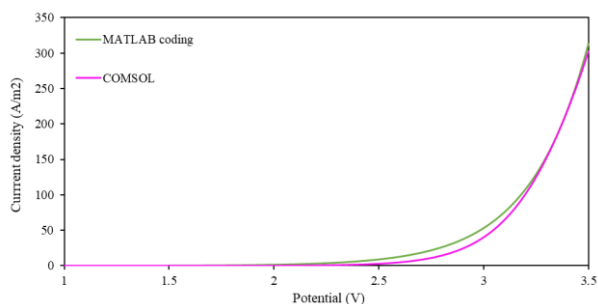


Figure 7. Comparing LSV curves obtained from coding in MATLAB and simulation through COMSOL

Alternatively, the effect of electrolyte concentration on mass transport can be modeled by introducing a limiting current density that depends on the concentration. However, the modeling of the limiting current density entails a considerable simplification: it presumes a uniform concentration field and disregards spatial variations, convective transport, and the effects of electrode geometry. This approximation may result in considerable inaccuracies in practical systems. It should also be noted whether there is a limiting current density in the system. In the perovskite materials we have investigated, no limiting current density has been observed in the potential ranges tested so far.

Table 4. The details of the parameters inserted into MATLAB and COMSOL software to obtain the LSV curve

Parameter	Symbol	Unit	Value
Tafel slope	b	V/dec	0.282
Equilibrium potential	E_{eq}	V	1.23
Applied potential range	E	V	1–3.5
Exchange current density	j_0	A/m ²	0.1

In contrast, COMSOL Multiphysics offers a comprehensive simulation environment that enables the direct input of physical and chemical properties, including electrolyte concentration. Without modifying the fundamental governing equations, one can quickly and accurately investigate the effect of electrolyte concentration on electrocatalyst performance by simply adjusting this parameter. This flexibility significantly reduces the time and cost of experimentation and analysis while enhancing confidence in the simulation results. Table 4 provides the details of the parameters inserted into MATLAB and COMSOL software to obtain the LSV curve.

Coupling COMSOL and ANN

Initially, the electrocatalytic performance of GR toward OER and HER was evaluated in a three-electrode setup to determine its electrochemical parameters, J_0 and b . Polarization curves under operating conditions of 25 °C and 70 °C are illustrated in Figure 8a and 8b. Subsequently, the Arrhenius diagram was plotted based on the exchange current density and temperature, allowing for the determination of J_0 without requiring further laboratory testing. This diagram can be used to predict J_0 at any temperature, as shown in Figures 8c and 8d. The slope of the Arrhenius plot exhibits values of -1556 and -602.1 for the OER and the HER curves, respectively.

The current density measured at 0 V vs. RHE was observed to be negative, with the cathodic current onset shifted toward more negative potentials. This phenomenon can be attributed to several well-established factors [52–54]. Firstly, graphite electrodes are known to catalyze oxygen reduction at low potentials due to the presence of dissolved O_2 , leading to the emergence of cathodic current even prior to the thermodynamic onset of the hydrogen evolution reaction (HER). Secondly, potential cycling during electrode conditioning may result in the activation of the graphite surface by introducing edge sites, structural defects, or partial oxidation. These modifications enhance the electrode's catalytic behavior and can shift the HER onset to more positive potentials. Additionally, graphite exhibits a relatively high double-layer capacitance, and capacitive (non-Faradaic) currents may contribute significantly to the background signal, particularly at low scan rates. To mitigate these effects, it is advisable to degas the electrolyte with N_2 or Ar prior to measurements and to minimize potential cycling when using freshly prepared electrodes.

Moreover, graphite demonstrates a markedly higher exchange current density (J_0) for the oxygen evolution reaction (OER) compared to HER, which can be explained by several material-specific properties [55–59]. Under anodic polarization, the graphite surface becomes enriched with oxygen-containing functional groups that increase its activity toward OER. In contrast, HER requires efficient hydrogen adsorption and fast electron transfer – conditions for which graphite is inherently less favorable due to its poor hydrogen binding characteristics. Furthermore, elevated temperatures and anodic potentials promote oxidative modifications on the graphite surface, generating reactive sites conducive to OER, while offering limited benefit to HER kinetics.

In summary, the higher j_0 observed for OER on graphite compared to HER reflects graphite's relatively better catalytic activity for OER due to the formation of active oxygen species on its surface and its inherent limitations in hydrogen adsorption. This is consistent with experimental findings and supports the understanding that graphite is a more efficient catalyst for OER than for HER.

PHOTOELECTROCHEMICAL WATER SPLITTING SIMULATION: TOWARD A COMPREHENSIVE MODELING FRAMEWORK

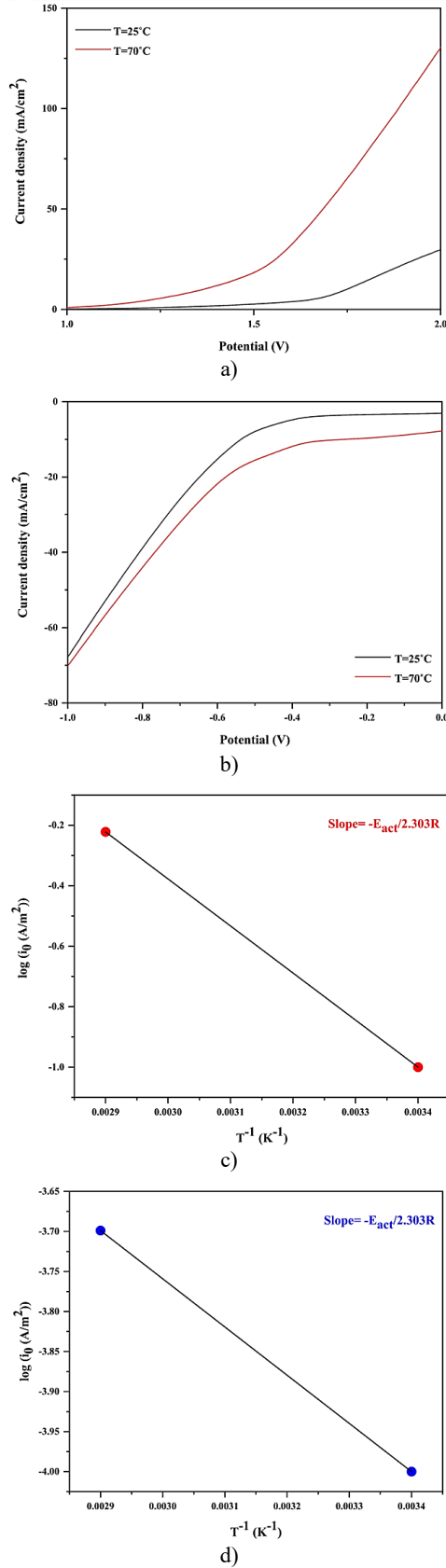


Figure 8. OER polarization curve (a), HER polarization curve (b), Arrhenius plot as anode (c), and Arrhenius plot as cathode (d) of the GR electrode

Checking mesh independence is one of the most essential steps in any simulation [60]. The non-dependence of the solution on the meshing should be checked in all simulation software that divides the computational domain into smaller sub-domains. Examining mesh independence involves selecting the optimal mesh to obtain accurate results. In this work, an independence test was conducted on the meshing results to determine the optimal meshing of the system. The number of elements in the Normal, Coarse, and Coarser meshes was 87,307, 66,808, and 24,655, respectively. Coarse meshing yields the most accurate results with the most optimized runtime and memory usage (Figure 9a).

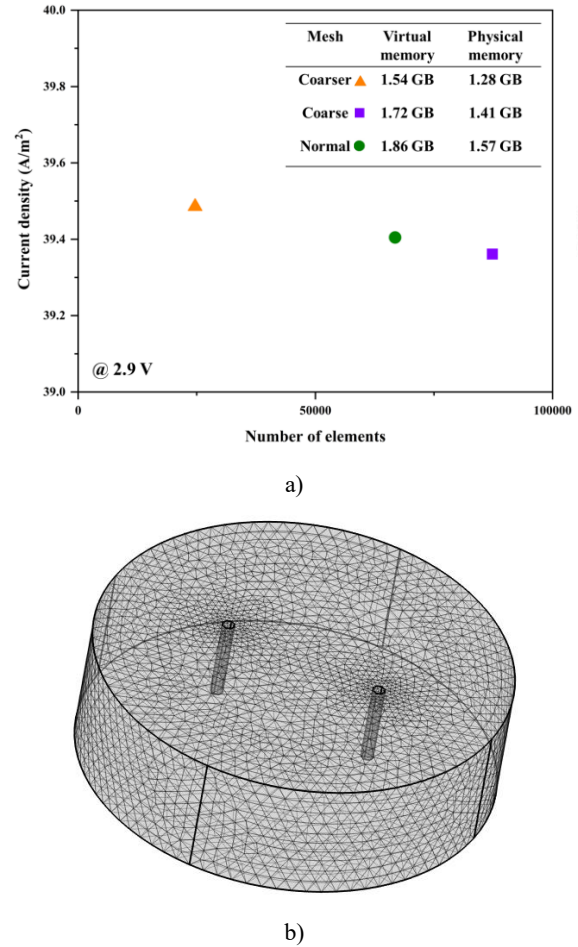


Figure 9. The current density @ 2.9 V in the different element numbers, the physical and virtual memory used (a) and Coarse system meshing (b)

The relative change between Coarse and Normal meshes was only 0.11%, indicating negligible variation [61]. Therefore, Coarse meshing was used in this work (Figure 9b).

Two phase flow results

We had previously observed during experimental tests that bubbles produced on the electrode surface do not separate from them and therefore do not enter the electrolyte phase, but instead act as a resistor. However, we attempted to model the system as a two-phase system,

so that after verifying whether the system is single-phase or two-phase, we could proceed with modeling it.

The bottom image shows the volume fraction of bubbles in the system, which we observe to be zero (Figure 10a). Figure 10b also indicates the electrolyte velocity distribution. The electrolyte in our experimental system remains stationary due to the absence of inflow or outflow, as well as the lack of electrolyte injection in the middle or RDE system, which would create movement within the electrolyte. The modeling results show a minimal value for the electrolyte velocity, which is confirmed to be correct. The stationary nature of the electrolyte is one of the reasons it remains single-phase, as the completely stationary phase prevents bubbles from moving.

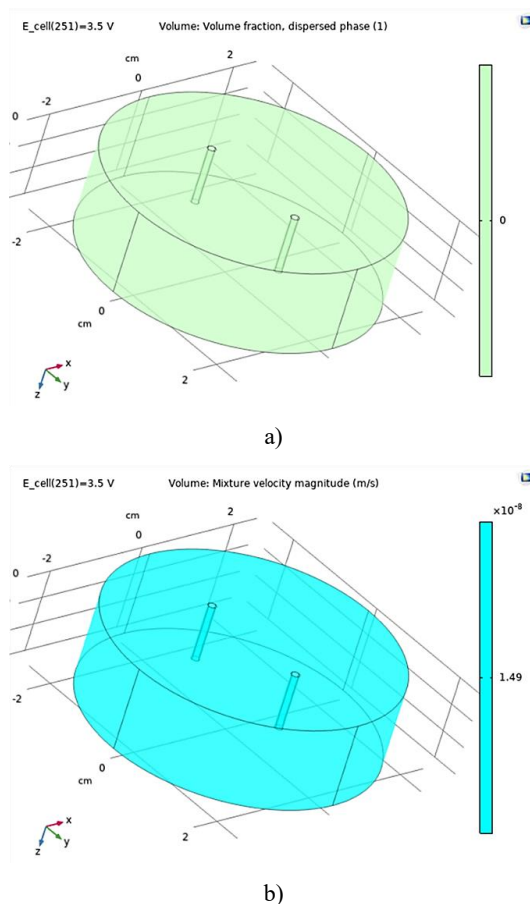


Figure 10. Volume fraction (a) and electrolyte phase velocity (b)

CONCLUSION

In this work, we developed and validated a hybrid modeling framework to simulate photoelectrochemical water splitting using both COMSOL Multiphysics and MATLAB environments. Through a series of simulations and ANN-based predictions, we demonstrated that both platforms can effectively model electrochemical processes such as impedance behavior and current–voltage characteristics. However, COMSOL proved to be more comprehensive and efficient, particularly due to its built-

in multiphysics solvers, flexible geometry handling, and direct parameter integration, such as electrolyte concentration, which is otherwise challenging to account for in MATLAB without extensive experimental data.

Moreover, we showed that coupling COMSOL simulations with machine learning tools in MATLAB (ANN) enables predictive modeling with high accuracy, thereby reducing the experimental workload. The inclusion of two-phase flow simulations confirmed the single-phase behavior of the system under stationary electrolyte conditions, with negligible bubble motion and volume fraction. Mesh independence testing further ensured the reliability and efficiency of the computational model.

This integrated approach not only enhances our understanding of PEC hydrogen production mechanisms but also contributes to the advancement of simulation techniques in electrochemical energy systems. Nevertheless, a limitation of this study is the absence of experimental validation; while the simulations provide valuable insights, their predictive reliability remains constrained without corresponding experimental confirmation. Future work will focus on extending the model to include new photoelectrode materials, implementing real-time data feedback into ANN models, and conducting in-depth experimental validations under variable light and electrolyte conditions to further optimize system performance for industrial application.

Acknowledgments

During the preparation of this work the authors used ChatGPT (Version 4.0) to improve the English language of this manuscript. All content was subsequently reviewed and edited by the authors, who take full responsibility for the final version of the publication.

Declaration of Competing Interest

The authors declare that the research was conducted in the absence of any commercial or financial relationships that could be construed as a potential conflict of interest.

Funding information

The author(s) declare that financial support was received for the research, authorship, and/or publication of this article. This research has been funded by the Science Committee of the Ministry of High Education and Science of the Republic of Kazakhstan (Grant No. AP23490626 “Research and development of ZnO/BiVO₄ and Cu₂O/ZnO photoelectrodes to create highly efficient tandem light-driven hydrogen production systems”).

REFERENCES

1. Hosseini S.E, Wahid M.A. Hydrogen production from renewable and sustainable energy resources: Promising green energy carrier for clean development // Renewable and Sustainable Energy Reviews. – 2016. – Vol. 57. – Issue C. – P. 850–866.
<https://doi.org/10.1016/j.rser.2015.12.112>

2. Ma P., Wang D. The principle of photoelectrochemical water splitting. *Nanomaterials for Energy Conversion and Storage* // World Scientific. – 2018. – Vol. 1. – P. 61.
3. Zhang H., Zhang B., Wang X., Zou L., You J., Lin S. Effective charge separation in photoelectrochemical water splitting: A review from advanced evaluation methods to materials design // *Sustain Energy Fuels*. – 2024.
4. Ager J.W. Photoelectrochemical approach for water splitting // *Solar to Chemical Energy Conversion: Theory and Application*. – 2016. – Vol. 249. – P. 60.
5. Feng S., et al. Using hollow dodecahedral NiCo-LDH with multi-active sites to modify BiVO₄ photoanode facilitates the photoelectrochemical water splitting performance // *Nano Research Energy*. – 2024. – Vol. 3(3).
6. Mane P., et al. Recent trends and outlooks on engineering of BiVO₄ photoanodes toward efficient photoelectrochemical water splitting and CO₂ reduction: A comprehensive review // *Int. J. of Hydrogen Energy*. – 2022. – Vol. 47(94). – P. 39796–39828.
7. Sung H., et al. Dense/nanoporous bilayer BiVO₄ photoanode with outstanding light-absorption efficiency for high-performance photoelectrochemical water splitting // *J. of Photochemistry and Photobiology A-Chemistry*. – 2024. – P. 449.
8. Fu L., Li Z., and Shang X. Recent surficial modification strategies on BiVO₄ based photoanodes for photoelectrochemical water splitting enhancement // *Int. J. of Hydrogen Energy*. – 2024. – Vol. 55. – P. 611–624.
9. Zhang Y., et al. Engineering BiVO₄ and Oxygen Evolution Cocatalyst Interfaces with Rapid Hole Extraction for Photoelectrochemical Water Splitting // *Acs Catalysis*. – 2023. – Vol. 13(9). – P. 5938–5948.
10. Fang G., Liu Z., and Han C. Enhancing the PEC water splitting performance of BiVO₄ co-modifying with NiFeOOH and Co-Pi double layer cocatalysts // *Applied Surface Science*. – 2020. – Vol. 515.
11. Shabdan Y., et al. Photoactive Tungsten-Oxide Nanomaterials for Water-Splitting // *Nanomaterials*. – 2020. – Vol. 10(9).
12. Yin D., et al. Dual modification of BiVO₄ photoanode for synergistically boosting photoelectrochemical water splitting // *J. of Colloid and Interface Science*. – 2023. – Vol. 646. – P. 238–244.
13. Kyaw A., et al. Fabrication and characterization of heterostructure WO₃/BiVO₄/TiO₂ photocatalyst for efficient performance of photoelectrochemical water splitting // *Current Applied Physics*. – 2025. – Vol. 72. – P. 87–92.
14. Wang L., et al. Recent advances in elaborate interface regulation of BiVO₄ photoanode for photoelectrochemical water splitting // *Materials Reports: Energy*. – 2023. – Vol. 3(4).
15. Teh I., et al. Engineering high-performance BiVO₄ homo- and heterojunction Photoanodes for solar-driven Photoelectrochemical water splitting applications // *Coordination Chemistry Reviews*. – 2025. – Vol. 541. – P. 216773.
16. G.A. Kaptagay, B.M. Satanova, A.U. Abuova, M. Konuhova, Zh.Ye. Zakiyeva, U.Zh Tolegen, N.O. Koilyk, F.U. Abuova, Effect of rhodium doping for photocatalytic activity of barium titanate // *Optical Materials: X*. – 2025. – Vol. 25. – P. 100382.
17. COMSOL Multiphysics, Electrochemistry Module User's Guide, version 5.4, Chapter 3: Electrochemistry Interfaces, COMSOL AB n.d.; 1998–2023, p. 60.
18. Idoko I.P., Ezeamii G.C., Idogho C., Peter E., Obot U.S., Iguoba V.A. Mathematical modeling and simulations using software like MATLAB, COMSOL and Python // *Magna Scientia Advanced Research and Reviews*. – 2024. – Vol. 12. – P. 62–95.
19. Dickinson E.J.F., Ekström H., Fontes E. COMSOL Multiphysics®: Finite element software for electrochemical analysis. A mini-review // *Electrochem Commun.* – 2014. – Vol. 40. – P. 71–74.
20. Bera S., Ghosh S., Shyamal S., Bhattacharya C., Basu R.N. Photocatalytic hydrogen generation using gold decorated BiFeO₃ heterostructures as an efficient catalyst under visible light irradiation // *Solar Energy Materials and Solar Cells*. – 2019. – Vol. 194. – P. 195–206.
21. Yan L., Zhao W., Liu Z. 1D ZnO/BiVO₄ heterojunction photoanodes for efficient photoelectrochemical water splitting // *Dalton Transactions*. – 2016. – Vol. 45. – P. 11346–11352.
22. Kim K., Moon J.H. Three-dimensional bicontinuous BiVO₄/ZnO photoanodes for high solar water-splitting performance at low bias potential // *ACS Appl Mater Interfaces*. – 2018. – Vol. 10. – P. 34238–34244.
23. Bai S., Jia S., Zhao Y., Feng Y., Luo R., Li D., et al. NiFePB-modified ZnO/BiVO₄ photoanode for PEC water oxidation // *Dalton Transactions*. – 2023. – Vol. 52. – P. 5760–5770.
24. Pihosh Y., Turkevych I., Mawatari K., Uemura J., Kazoe Y., Kosar S., et al. Photocatalytic generation of hydrogen by core-shell WO₃/BiVO₄ nanorods with ultimate water splitting efficiency // *Sci. Rep.* – 2015. – Vol. 5. – P. 11141.
25. Yin X., Yang X., Qiu W., Wang K., Li W., Liu Y., et al. Boosting the photoelectrochemical performance of BiVO₄ photoanodes by modulating bulk and interfacial charge transfer // *ACS Appl. Electron Mater.* – 2021. – Vol. 3. – P. 1896–1903.
26. Kim T.W., Choi K-S.. Nanoporous BiVO₄ photoanodes with dual-layer oxygen evolution catalysts for solar water splitting // *Science (1979)*. – 2014. – Vol. 343. – P. 990–994.
27. Yang J-S., Wu J-J.. Low-potential driven fully-depleted BiVO₄/ZnO heterojunction nanodendrite array photoanodes for photoelectrochemical water splitting // *Nano Energy*. – 2017. – Vol. 32. – P. 232–240.
28. Tolod K.R., Hernández S., Russo N. Recent advances in the BiVO₄ photocatalyst for sun-driven water oxidation: top-performing photoanodes and scale-up challenges // *Catalysts*. – 2017. – Vol. 7. – P. 13.
29. Wu H., Zhang L., Qu S., Du A., Tang J., Ng Y.H. Polaron-mediated transport in BiVO₄ photoanodes for solar water oxidation // *ACS Energy Lett.* – 2023. – Vol. 8. – P. 2177–2184.
30. Vilanova A., Dias P., Lopes T., Mendes A. The route for commercial photoelectrochemical water splitting: a review of large-area devices and key upscaling challenges // *Chem. Soc. Rev.* – 2024. – Vol. 53. – P. 2388–2434.
31. Diaby M., Alimi A., Bardaoui A., Santos D.M.F., Chtourou R., Ben Assaker I. Correlation between the experimental and theoretical photoelectrochemical response of a WO₃ electrode for efficient water splitting through the implementation of an artificial neural network // *Sustainability*. – 2023. – Vol. 15. – P. 11751.
32. Huang H., Obata K., Kishimoto F., Takanabe K. Numerical modeling investigations of the impact of a thin p-type

- cocatalyst modifier on an n-type photon absorber for unbiased overall solar water splitting // *Mater. Adv.* – 2022. – Vol. 3. – P. 9009–9018.
33. Njoka F.N., Ahmed M.A., Ookawara S. Design of a novel photoelectrochemical reactor for hydrogen production // *Energy and Sustainability VII.* – 2017. – Vol. 224. – P. 349.
34. Haussener S., Hu S., Xiang C., Weber A.Z., Lewis N.S. Simulations of the irradiation and temperature dependence of the efficiency of tandem photoelectrochemical water-splitting systems // *Energy Environ. Sci.* – 2013. – Vol. 6. – P. 3605–3618.
35. Chen Y. Numerical Simulation of Performance and Solar-To-Fuel Conversion Efficiency for Photoelectrochemical Devices // *California Institute of Technology.* – 2021.
36. Cendula P., Schumacher J.O. Spectroscopic modeling of photoelectrochemical water splitting. COMSOL Conference, Munich, Germany, 12-14 October 2016, COMSOL Group. – 2016.
37. Haussener S., Xiang C., Spurgeon J.M., Ardo S., Lewis N.S., Weber A.Z. Modeling, simulation, and design criteria for photoelectrochemical water-splitting systems // *Energy Environ. Sci.* – 2012. – Vol. 5. – P. 9922–9935.
38. Dhalsamant K. Development, validation, and comparison of FE modeling and ANN model for mixed-mode solar drying of potato cylinders // *J. Food Sci.* – 2021. – Vol. 86. – P. 3384–3402.
39. Yang W., Sun L., Tang J., Mo Z., Liu H., Du M., et al. Multiphase fluid dynamics and mass transport modeling in a porous electrode toward hydrogen evolution reaction // *Ind. Eng. Chem. Res.* – 2022. – Vol. 61. – P. 8323–8332.
40. Caspersen M., Kirkegaard J.B. Modelling electrolyte conductivity in a water electrolyzer cell // *Int. J. Hydrogen Energy.* – 2012. – Vol. 37. – P. 7436–7441.
41. Gilliam R.J., Graydon J.W., Kirk D.W., Thorpe S.J. A review of specific conductivities of potassium hydroxide solutions for various concentrations and temperatures // *Int. J. Hydrogen Energy.* – 2007. – Vol. 32. – P. 359–364.
42. Alom M.S., Kananke-Gamage C.C.W., Ramezanipour F. Perovskite oxides as electrocatalysts for hydrogen evolution reaction // *ACS Omega.* – 2022. – Vol. 7. – P. 7444–7451.
43. Rodríguez J., Amores E. CFD modeling and experimental validation of an alkaline water electrolysis cell for hydrogen production // *Processes.* – 2020. – Vol. 8. – P. 1634.
44. Li W., Tian H., Ma L., Wang Y., Liu X., Gao X. Low-temperature water electrolysis: fundamentals, progress, and new strategies // *Mater. Adv.* – 2022. – Vol. 3. – P. 5598–5644.
45. Lamy C., Millet P. A critical review on the definitions used to calculate the energy efficiency coefficients of water electrolysis cells working under near ambient temperature conditions // *J. Power Sources.* – 2020. – Vol. 447. – P. 227350.
46. Lettenmeier P. Efficiency–electrolysis. Siemens Energy Global GmbH Co KG, München, Germany, White Paper 2021.
47. Doering C.R., Gibbon J.D. Applied analysis of the Navier-Stokes equations. Cambridge university press, 1995.
48. Chen W., Zhang L. Effects of interphase forces on multiphase flow and bubble distribution in continuous casting strands // *Metallurgical and Materials Transactions B.* – 2021. – Vol. 52. – P. 528–547.
49. Le Bideau D., Mandin P., Benbouzid M., Kim M., Sellier M., Ganci F., et al. Eulerian two-fluid model of alkaline water electrolysis for hydrogen production // *Energies (Basel).* – 2020. – Vol. 13. – P. 3394.
50. Enwald H., Peirano E., Almstedt A-E. Eulerian two-phase flow theory applied to fluidization // *International Journal of Multiphase Flow.* – 1996. – Vol. 22. – P. 21–66.
51. Romagnuolo L., Yang R., Frosina E., Rizzoni G., Andreozzi A., Senatore A. Physical modeling of evaporative emission control system in gasoline fueled automobiles: A review // *Renewable and Sustainable Energy Reviews.* – 2019. – Vol. 116. – P. 109462.
52. Ricke N.D., Murray A.T., Shepherd J.J., Welborn M.G., Fukushima T., Van Voorhis T., et al. Molecular-level insights into oxygen reduction catalysis by graphite-conjugated active sites // *ACS Catal.* – 2017. – Vol. 7. – P. 7680–7687.
53. Gerischer H. An interpretation of the double layer capacity of graphite electrodes in relation to the density of states at the Fermi level // *J. Phys. Chem.* – 1985. – Vol. 89. – P. 4249–4251.
54. Allen B.W., Piantadosi C.A. Electrochemical activation of electrodes for amperometric detection of nitric oxide // *Nitric Oxide.* – 2003. – Vol. 8. – P. 243–252.
55. Rahimian M., Ghaffarinejad A., Arabi M. Water splitting by electrodeposition Ni–Co on graphite rod: Low-cost, durable, and binder-free electrocatalyst // *Int. J. Hydrogen Energy.* – 2024. – Vol. 81. – P. 852–864.
56. Lipka S.M., Cahen Jr G.L., Stoner G.E., Scribner Jr L.L., Gileadi E. Hydrogen and oxygen evolution on graphite fiber–epoxy matrix composite electrodes // *Electrochim. Acta.* – 1988. – Vol. 33. – P. 753–760.
57. Chhetri M., Sultan S., Rao C.N.R.. Electrocatalytic hydrogen evolution reaction activity comparable to platinum exhibited by the Ni/Ni (OH) 2/graphite electrode // *Proceedings of the National Academy of Sciences.* – 2017. – Vol. 114. – P. 8986–8990.
58. Ficca V.C.A., Santoro C., Placidi E., Arciprete F., Serov A., Atanassov P., et al. Exchange current density as an effective descriptor of poisoning of active sites in platinum group metal-free electrocatalysts for oxygen reduction reaction // *ACS Catal.* – 2023. – Vol. 13. – P. 2162–2175.
59. Danaee I., Noori S. Kinetics of the hydrogen evolution reaction on NiMn graphite modified electrode // *Int. J. Hydrogen Energy.* – 2011. – Vol. 36. – P. 12102–12111.
60. Sadrehaghighi I. Mesh Sensitivity & Mesh Independence Study. CFD Open Series: Annapolis, MD, USA. – 2021. – P. 56.
61. Lee M., Park G., Park C., Kim C. Improvement of grid independence test for computational fluid dynamics model of building based on grid resolution // *Advances in Civil Engineering.* – 2020. – Vol. 2020. – P. 8827936.

СУДЫҢ ФОТОЭЛЕКТРОХИМИЯЛЫҚ ЫДЫРАУЫН МОДЕЛЬДЕУ:
КЕШЕНДІ МОДЕЛЬДЕУ ЖҮЙЕСІН ҚҰРУ ЖОЛЫНДА

Н. Бакранов¹, Б. Сейтов², Д. Бакранова^{3*}, Е. Фаттах^{4,5}, А. Чорух⁴, А. Ниаен⁴

¹ *Research Group altAir Nanolab ЖШС, Алматы, Қазақстан*

² *Қожа Ахмет Ясауи атындағы Халықаралық қазақ-түрік университеті, Түркістан, Қазақстан*

³ *SDU University, Инженерия және жаратылыстану ғылымдары факультеті, Қаскелең, Қазақстан*

⁴ *Физика кафедрасы, Жаратылыстану ғылымдары факультеті, Сакария университеті, Сакария, Түркия*

⁵ *Химиялық инженерия кафедрасы, Табриз университеті, Табриз, Иран*

* Байланыс үшін E-mail: dinabakranova@gmail.com

Бұл зерттеуде суды ыдырататын фотоэлектрохимиялық (ФЭХ) жүйелерді талдау және оңтайландыру үшін физикалық модельдеу мен деректерге негізделген тәсілдерді біріктіретін кешенді есептеу платформасы ұсынылған. COMSOL Multiphysics 6.1 және MATLAB көмегімен сызықтық вольтамперометрия (СВА) және электрохимиялық импеданс спектроскопиясы (ЭИС) сияқты негізгі электрохимиялық процестер модельденеді. COMSOL мультифизикалық ортасы электролит параметрлерін, жартылай өткізгіштердің фотофизикалық қасиеттерін және токтың таралуын тікелей есепке алуға мүмкіндік береді, ал MATLAB жасанды нейрондық желілерді (ЖНЖ) пайдалана отырып, реттелетін импеданс өзгерісін модельдеуді және СВА болжамды талдауын реттеуге мүмкіндік береді. Есептеу гидродинамикасының (ЕГД), машиналық оқытудың және эксперименттік тексерудің үйлесімі арқылы ұсынылған әдістеме ZnO/BiVO_4 сияқты жартылай өткізгіш электродтардағы жарықтың әсерінен сутектің пайда болу процесін терең түсінуге мүмкіндік береді. Модельдеу нәтижелерін салыстырмалы талдау COMSOL мен MATLAB үйлесімді нәтижелерді қамтамасыз ететінін көрсетті, COMSOL, әсіресе физикалық және химиялық жағдайлардың айнымалылары әсер ететін жүйелер үшін тамаша икемділікті, дәлдікті және пайдаланудың қарапайымдылығын көрсетеді. Зерттеу екі фазалы ағынды модельдеуді, торлардың тәуелсіздігін тексеруді және газ көпіршіктерінің электролит өткізгіштігіне әсерін одан әрі қарастырады. Нәтижелер таза сутекті өндіру үшін тиімді масштабталатын электрохимиялық синтез жүйелерін (ПЕС) дамытуға ықпал етеді және гибриді модельдеу мен жасанды интеллект әдістерін жаңартылатын энергия көздерін зерттеуге болашақта біріктіруге негіз қалайды.

Түйін сөздер: суды фотоэлектрохимиялық бөлу, COMSOL Multiphysics, MATLAB, электрохимиялық импеданс спектроскопиясы, жасанды нейрондық желілер, сутегі өндірісі, электрохимиялық модельдеу.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОТОЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОГО РАСЩЕПЛЕНИЯ ВОДЫ:
НА ПУТИ К СОЗДАНИЮ КОМПЛЕКСНОЙ СИСТЕМЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Н. Бакранов¹, Б. Сейтов², Д. Бакранова^{3*}, Е. Фаттах^{4,5}, А. Чорух⁴, А. Ниаеи⁴

¹ *Research Group altAir Nanolab TOO, Алматы, Казахстан*

² *Международный казахско-турецкий университет имени Х.А. Ясави, Туркестан, Казахстан*

³ *SDU University, Факультет инженерии и естественных наук, Каскелен, Казахстан*

⁴ *Кафедра физики, факультет естественных наук, Университет Сакаръя, Сакаръя, Турция*

⁵ *Кафедра химической инженерии, Тебризский университет, Тебриз, Иран*

* E-mail для контактов: dinabakranova@gmail.com

В данном исследовании представлена комплексная вычислительная платформа, объединяющая физическое моделирование и подходы, основанные на данных, для анализа и оптимизации фотоэлектрохимических (ФЭХ) систем разложения воды. Используя COMSOL Multiphysics 6.1 и MATLAB, моделируются ключевые электрохимические процессы, такие как линейная вольтамперометрия (ЛВА) и электрохимическая импедансная спектроскопия (ЭИС). Мультифизическая среда COMSOL позволяет напрямую учитывать параметры электролита, фотофизические свойства полупроводников и распределение тока, в то время как MATLAB позволяет настраивать пользовательское моделирование поведения импеданса и предиктивный анализ ЛВА с использованием искусственных нейронных сетей (ИНС). Благодаря сочетанию вычислительной гидродинамики (ВГД), машинного обучения и экспериментальной проверки предлагаемая методология обеспечивает глубокое понимание процесса генерации водорода под действием света на полупроводниковых электродах, таких как ZnO/BiVO₄. Сравнительный анализ результатов моделирования показывает, что COMSOL и MATLAB обеспечивают согласованные результаты, при этом COMSOL демонстрирует превосходную гибкость, точность и простоту использования, особенно для систем, подверженных влиянию переменных физических и химических условий. В исследовании дополнительно рассматриваются моделирование двухфазного потока, тестирование независимости сеток и влияние пузырьков газа на проводимость электролита. Полученные результаты способствуют разработке эффективных масштабируемых систем электрохимического синтеза (ПЕС) для производства чистого водорода и закладывают основу для будущей интеграции гибридного моделирования и методов искусственного интеллекта в исследования возобновляемой энергетики.

Ключевые слова: фотоэлектрохимическое расщепление воды, COMSOL Multiphysics, MATLAB, электрохимическая импедансная спектроскопия, искусственные нейронные сети, производство водорода, электрохимическое моделирование.

<https://doi.org/10.52676/1729-7885-2025-4-142-149>

УДК 669

НАНОКОМПОЗИТТИ (CrN/ZrN)/(Cr/Zr) НЕГІЗІНДЕГІ ЖАБЫНДАРДЫҢ НАНОӨЛШЕМДІ АРХИТЕКТУРАСЫ

Р. Е. Сакенова^{1*}, А. Д. Погребняк², Л. С. Баймолданава¹

¹ «Сәрсен Аманжолов атындағы Шығыс Қазақстан университеті» КЕ АҚ, Өскемен, Қазақстан

² Сумы мемлекеттік университеті, Сумы, Украина

* Байланыс үшін E-mail: sakenovirim@gmail.com

Ауыспалы металл нитридтерінен (CrN/ZrN) және (Cr/Zr) таза металдардан тұратын периодты түрде алмасатын көпқабатты нанокұрылымды қабықшаның микроқұрылымы мен механикалық қасиеттері зерттелді. Әрқайсысы модуляциялық кезеңде 7 металл мен 40 нитридті қосақталған қабаттан тұратын арнайы көпқабатты құрылым алынды. Әрбір металл қабатының қалыңдығы 16 нм болса, ал нитрид қабаттарының қалыңдығы 25 нм құрайды. Жабын беріктігінің арту механизмін түсіндіру үшін, алынған нәтижелер бойынша бірінші принциптерге негізделген есептеулер жүргізілді.

Микроқұрылымдық зерттеулер нәтижесі (200) және (111)/(200) бағыттарында ерекше айқындалған кубтық құрылымды CrN мен ZrN фазалары басым екені анықталды. Наноқабаттар мен нанокристалдардың наноөлшемдеріне қарамастан, CrN мен ZrN қабаттарының шекараларында дислокациялар мен кристалл жазықтықтарының құрылымдық ретсіздігі байқалды.

Зерттелген көпқабатты құрылымның ең жоғары қаттылығы 34 ГПа, төмендетілген серпімділік модулі 330 ГПа, пластикалық деформацияға дейінгі серпімділік шегі 0,1, сонымен бірге пластикалық деформацияға төзімділігі 0,36 құрайтын жоғары механикалық қасиеттерге қол жеткізуге мүмкіндік берді.

Аталған жоғары қасиеттер жабындардың ерекше көпқабатты-құрылымды (ішкі көпқабатты) архитектурасы мен оның құрылымдық сипаттамаларының нәтижесінде іске асырылды.

Түйін сөздер: фазалық құрам, нитридтер, микроқұрылым, көпқабатты жабын, дислокация, қатты жабын.

КІРІСПЕ

Өндірісте құралдар мен бұйымдардың сапасын арттыру мен қызмет ету мерзімін ұзартудың ең тиімді әрі экономикалық жағынан оңтайлы тәсілдерінің бірі – олардың беткі қабатын қатты жабындармен модификациялау болып табылады. Жабындарды алу үшін химиялық бу фазасында тұндыру (CVD), атомдық қабаттық тұндыру (ALD) [1], физикалық бу фазасында тұндыру (PVD) [2] және тағы басқа әртүрлі әдістер қолданылады. Бұл әдістердің көптігі нақты технологиялық талаптарға сай келетін оңтайлы үрдісті таңдауға жол ашады.

Бүгінгі таңда құрал-саймандардың жұмыс тиімділігі мен қызмет ету мерзімін арттырудың маңызды бағыттарының бірі – өтпелі металдар мен отқа төзімді элементтер негізінде нитридтік жабындар алу болып табылады. Автордың [3] зерттеуінде қатты жабындарды олардың байланыс типтеріне қарай жіктеу ұсынылған. Өтпелі металдардың нитридтері, карбидтері және оксинитридтері (әсіресе Периодтық жүйенің IV, V және VI топтарына жататын элементтер) тозуға төзімді жабындарды қалыптастыруда жоғары тиімділік көрсетеді.

Көпқабатты жабын құрылымындағы градиенттік ауысу аймағы адгезияны жақсартуға, коррозия мен тозуға қарсы тұру қабілетін арттыруға, сондай-ақ түрлі функцияларды бір құрылымда біріктіруге мүмкіндік береді. Нанометрлік қалыңдықтағы әртүрлі физикалық және механикалық қасиеттерге ие қабаттардың кезектесіп орналасуы ішкі кернеулерді

шоғырландыру, жарықшақтардың таралу жолын өзгерту және сынуға төзімділікті арттыру арқылы көпқабатты жүйенің жалпы механикалық қасиеттері айтарлықтай жақсартады [4].

Қатты қорғаныш жабындар үшін 1960 жылдардан бастап бірқатар материалдар әлемдік деңгейде мойындалған [5]. Дегенмен, қазіргі таңда TiN негізіндегі жабындар мен өзге де бірқабатты екі компонентті металл нитридтері күрделі өндірістік міндеттер мен заманауи талаптарды толықтай қанағаттандыра алмай отыр [6, 7].

Қорғаныш ретінде қолданылатын жабындардың қаттылығын арттыруға арналған тәсілдердің көбі материалдың түйіршіктер өлшемін реттеу арқылы беріктікті күшейтетін Холл-Петч заңдылығына негізделді. Алайда қатты жабындар көп жағдайда морт сынғыштыққа бейім болады [8, 9]. Сондықтан бұл материалдардың зақымдануға төзімділігін арттыру үшін серпімділік қасиеттері мен тұтқырлығының, яғни жарықшақ таралуына қарсы тұру қабілетінің қолайлы деңгейін сақтау өте маңызды.

Алынған көпқабатты жабын құрылымы жарықшақтардың таралуын тежей отырып, олардың қабатаралық шекаралар бойымен бағыттанып, төсенішке дейін жетуін болдырмауға мүмкіндік тудырады. Мұндай әсер көптеген зерттеулермен дәлелденген және қазіргі заманғы қаптамаларда кеңінен байқалады [10]. Бұл механизм қаттылығы мен ығысу модульдері әртүрлі фазалардан тұратын қабаттар қолданылған жағдайда өте тиімді жұмыс жасайды.

Me/MeN типтегі (мұндағы Me – «металл») көпқабатты құрылымдарды қолдану арқылы жоғары нәтижелерге қол жеткізілгені белгілі. Мұндай жүйелерге Ti/TiN [11], Cr/CrN [12] және өзге де жабын құрамалары жатады. Зерттеулер көрсеткендей, қатты, бірақ морт CrN сияқты металл нитриді мен жұмсақ, бірақ тұтқыр Cr сияқты металл фазасын көпқабатты «сэндвич» түрінде біріктіру арқылы әрбір компоненттің тозуға төзімділігі айтарлықтай жақсарады.

Бұл зерттеуде (CrN/ZrN)/(Cr/Zr) құрылымына ие көпқабатты жабынды алу әдісін ұсынды. (CrN/ZrN)/(Cr/Zr) жабынын екі металл нысанмен және азот жеткізу жүйесімен жабдықталған кез келген көпқабатты жабынға арналған PVD қондырғысының көмегімен алуға болады.

CrN және ZrN материалдары (Me_1N/Me_2N)/(Me_1/Me_2) түріндегі құрылымдарды зерттеу үшін таңдалды, себебі олар екі компонентті нитридтер мен таза металдар ретінде жоғары қаттылық пен трибологиялық сипаттамаларға ие [13]. Бұл материалдар TiN-мен салыстырғанда тозуға және коррозияға төзімділік жағынан жоғары нәтижелер көрсетуі мүмкін [14].

CrN жабыны 600 °C-қа дейінгі термиялық тұрақтылығымен, тотығуға қарсы тұру қабілетімен және болат құралдармен жақсы адгезиясымен ерекшеленеді. Сонымен қатар, Cr және CrN қабаттары тотығу кезінде майлау әсерін беретін қосылыстар түзе отырып, үйкеліс коэффициентін төмендетуге ықпал етеді.

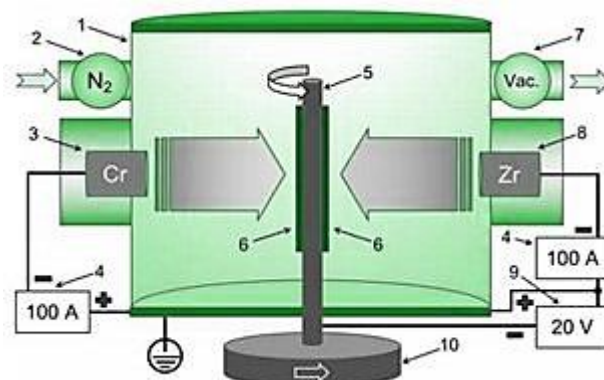
CrN және ZrN қабаттарының тор тұрақтарының (торлық параметрлерінің) аз айырмашылығы жүйедегі ішкі кернеулерді азайтып, жабынның өнеркәсіптік қолданудағы сенімділігін арттыра түседі.

Бұл жұмыс нәтижесінде (CrN/ZrN)/(Cr/Zr) көпқабатты жабындар құрылымдық ерекшеліктері мен жақсартылған функционалдық қасиеттерінің арқасында күрделі жұмысқа қажетті құралдардың сенімділігі мен қызмет ету мерзімін арттыруға мүмкіндік береді. Осы жабындар жаңа буындағы тозуға төзімді, тиімді және ұзақ мерзімді қорғаныс материалдары ретінде болашағы зор болады.

МАТЕРИАЛДАР ЖӘНЕ ЗЕРТТЕУ ӘДІСТЕРІ

Вакуумдық-доғалық буландыру әдісімен көпқабатты жабындарды алу. Қондырғы доғалық буландыру (Arc-PVD) әдісіне тән тамшы тәрізді макробөлшектердің (тамшы тәрізді бөлшектердің) жабынға түсуін болдырмау үшін арнайы сүзгілеу жүйесімен жабдықталған. Жабындарды тұндыру үшін алдын ала айнадай жылтыратылған, тот баспайтын болаттан жасалған үлгілер қолданылды. Үлгі 12X18H9T маркалы болаттан жасалған, ол халықаралық стандарттағы SUS321 және 321S20 маркаларына сәйкес келеді.

Көпқабатты жабындар Bulat-6 қондырғысында хром және цирконий катодтарын пайдалана отырып, вакуумдық-доғалық буландыру (Arc-PVD) әдісімен алынған. Жабынды тұндыру жүйесінің принциптік сызбасы 1-суретте көрсетілген.

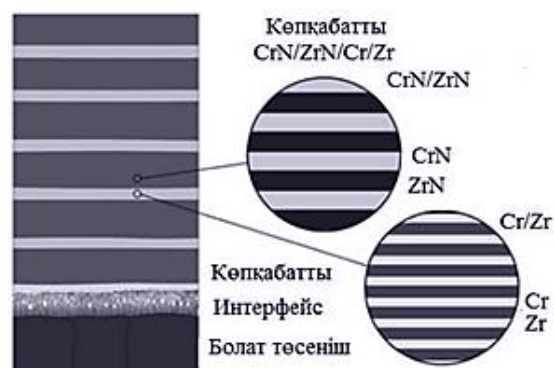


1 – вакуумды камера; 2 – азотпен қамтамасыз ету құралы; 3 – хром катоды; 4 – доғалық қуат көздері; 5 – төсенішті ұстағыш; 6 – төсеніш; 7 – вакуумдық сорғы; 8 – цирконий катоды, 9 – төсеніштің қорек көзі; 10 – төсенішті ұстағышты автоматты түрде айналдыру жүйесі

1-сурет – Көпқабатты жабынды алуға арналған вакуумды-доғалық тұндыру жүйесінің сызбасы [15]

Жабынды тұндыру процесі кезінде үлгілердің ұстағышы тұрақты түрде 8 айн/мин жылдамдықпен айналып тұрды, бұл жабынның біркелкі түсуіне мүмкіндік береді. Жұмыс барысында азот қысымы үнемі реттеліп отырды және металл нитриді мен таза металл қабаттарын кезектестіріп алу үшін қолайлы жағдай жасалды. Қысым келесі режимде өзгертілді: $P_N = 0,53$ Па кезінде 5 минут – нитрид қабаттарын тұндыру үшін, және $P_N = 0,03$ Па кезінде 1 минут – таза металл қабаттарын алу үшін.

Азот қысымының осындай циклдік реттелуі және үлгінің тұрақты айналуы нәтижесінде 2-суретте көрсетілген көпқабатты құрылым түзіледі.



2-сурет – Көпқабатты жабындарға арналған вакуумды-доғалық тұндыру жүйесінің сызбасы [16]

Хром (Cr) және цирконий (Zr) катодтарына берілген ток күші 100 А болды, ал үлгіге қолданылған ығысу кернеуі –100 В деңгейінде сақталды. Жабындарды тұндырудың жалпы ұзақтығы 6 сағатты құрады. Катодтар мен үлгінің арақашықтығы 200 мм болды.

Жабындардың фазалық құрамын анықтау үшін рентгендік дифракциялық (XRD) талдау жүргізілді.

891-нөмірлі үлгіге, яғни (CrN–ZrN)/(Cr–Zr) типті көпқабатты құрылымы бар жабынға, трансмиссия-

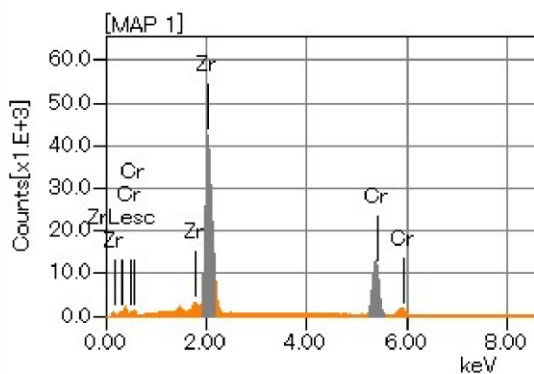
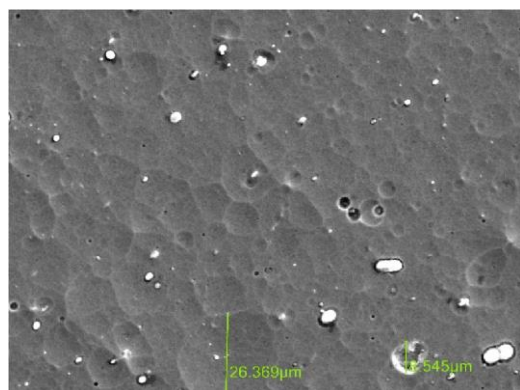
лық электрондық микроскопия (TEM) арқылы зерттеу жүргізілді. Үлгілер TEM-ге дайындау үшін дәстүрлі көлденең қималау әдісімен дайындалды. Алдымен үлгі механикалық түрде жылтыратылып, қалыңдығы шамамен 100 мкм-ге дейін жұқартылды. Содан кейін үлгі аргон ионды сәулесімен өңделді (Gatan PIPS 2 құрылғысы қолданылды): бастапқыда 5 кВ кернеуде тесік пайда болғанша, кейін 3 кВ кернеуде 30 минут, соңғы кезеңде 1 кВ кернеуде 15 минут бойы өңдеу жүргізілді.

ТЕМ зерттеулері JEOL F200 S/TEM құрылғысында 200 кВ үдеткіш кернеуінде орындалды.

НӘТИЖЕЛЕР МЕН ТАЛДАУЛАР

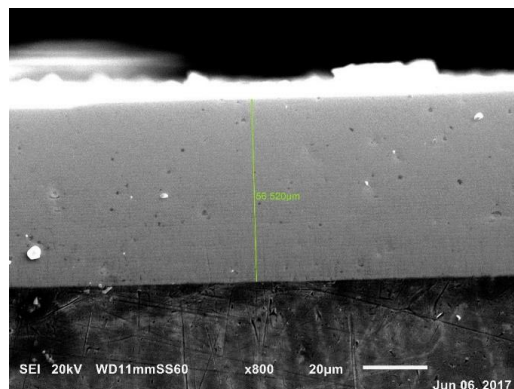
(CrN/ZrN)/(Cr/Zr) үлгісінің беткі морфологиясы 3-суретте көрсетілген. Ұсынылған ЭШМ (SEM) бейнесінде жабынның тығыз орналасқан, баған тәрізді өсу құрылымы анық байқалады. Бағаналы дәндердің арасындағы шекаралар мен олардың түбінде түзілген сайлар жақсы көрінеді. Кейбір дәндердің бетінде ұсақ құрылымдардың әлсіз білінетін шыңдары байқалады. Суреттегі ақ нүкте тәрізді бөлшектердің көпшілігі – вакуумдық камерада түскен бөгде бөлшектер немесе үлгіні дайындау кезінде түскен шаң-тозаң болуы мүмкін.

Тұндыру қондырғысына арнайы сүзгілеу жүйесі орнатылғанына қарамастан, Arc-PVD әдісіне тән бірнеше микротамшы бөлшектердің жабын бетінде және көлденең қимадағы SEM бейнелерінде кездесетіні байқалды.

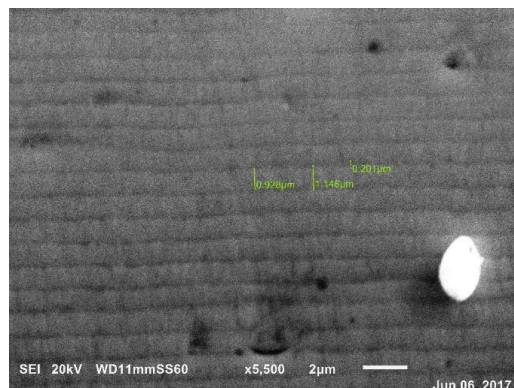


3-сурет – EDS көмегімен алынған жабын беті

Энергия-дисперсиялық спектроскопия (EDS) арқылы алынған элементтік құрам нәтижелеріне сәйкес, жабындағы Cr/Zr қатынасы 0,59-ға тең болды. 3-суретте бұл мәліметтер үлгінің беткі қабатында алынғанымен, жеке қабаттардың қалыңдығы өте жұқа (15 нм-ге дейін) болғандықтан, нәтижелер жабынның бүкіл тереңдігіне тән деп есептеледі.



а)



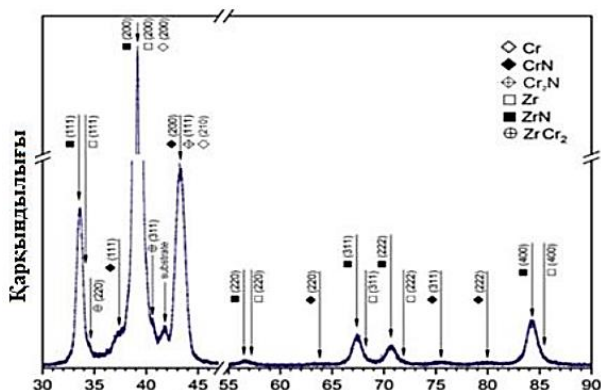
б)

4-сурет – (CrN/ZrN)/(Cr/Zr) жабындарының көлденең қимасының SEM көмегімен алынған талдау нәтижелері: (а) көлденең қимасының толық профилінің көрінісі, жалпы қалыңдығы; (б) ұлғайтылған SEM-көрінісі, кезекпен орналасқан жабын қалыңдығы

(CrN/ZrN)/(Cr/Zr) көпқабатты жабындысының $\theta/2\theta$ геометриясында, параллель сәуле режимінде жүргізілген рентгендік дифракциялық (XRD) талдауының нәтижелері 5-суретте көрсетілген. Үлгіде кубтық құрылымға ие CrN және ZrN негізгі екі фазасы анықталды. Хром және цирконий нитридтері қабаттарында кристаллдардың (200) бағытында жоғары дәрежеде бағдарланған өсуі байқалады.

ZrN фазасының дифракциялық шыңдарының интенсивтігі CrN-нің шыңдарына қарағанда әлдеқайда жоғары. Жұқа Cr және Zr металл қабаттары XRD спектрлерінде айтарлықтай әлсіз көрінеді.

Сонымен бірге, $34,5^\circ$, $40,7^\circ$ және $41,8^\circ$ бұрыштардағы әлсіз шыңдар Cr₂Zr қосылысының (220) және (311) жазықтықтарының, сондай-ақ (CrN–ZrN) қатты ерітіндісінің (200) жазықтығына сәйкес келуі ықтимал.



5-сурет – Темір болат төсенішке тұндырылған (CrN/ZrN)/(Cr/Zr) көпқабатты жабынның рентгендік дифракциялық үлгілері ($\theta/2\theta$, параллель сәуле режимі)

Ескерту керек, зерттелген XRD спектрінде дифракциялық шыңдардың төмен бұрыштар жағына ығысуы байқалады. Бұл құбылыс қабаттағы жазықтықаралық қашықтықтың ұлғаюымен қатар, жабындағы қалдық кернеулердің бар екендігін көрсетеді. CrN және ZrN фазаларының кристаллиттерінің өлшемдері мен жетілдірілген тор параметрлері 1-кестеде берілген. Ал таза Cr және Zr металдарының қабаттары үшін осы параметрлерді анықтау қиындық туғызды, өйткені олардың дифракциялық шыңдары әлсіз көрініп, металл нитридтерінің шыңдарымен қабаттасады.

1-кесте – CrN және ZrN фазаларының кристаллиттерінің өлшемдері мен жетілдірілген тор параметрлері

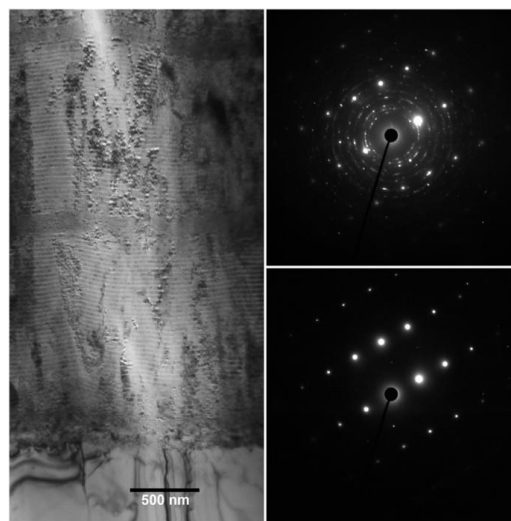
Фазалар	Тор тұрақтысы a , Å	Орташа түйіршік мөлшері, nm
CrN	4,19	9,1
ZrN	4,60	12,6

Жабынның жеке қабаттарын бөлек талдау үшін төмен бұрыштық (grazing incidence) рентгендік дифракция (XRD) әдісі де қолданылды. Дегенмен, қабаттардың қалыңдығы өте жұқа болғандықтан, алынған XRD спектрлері дәстүрлі $\theta/2\theta$ өлшемдерімен салыстырғанда ешқандай айтарлықтай айырмашылық көрсетпеді.

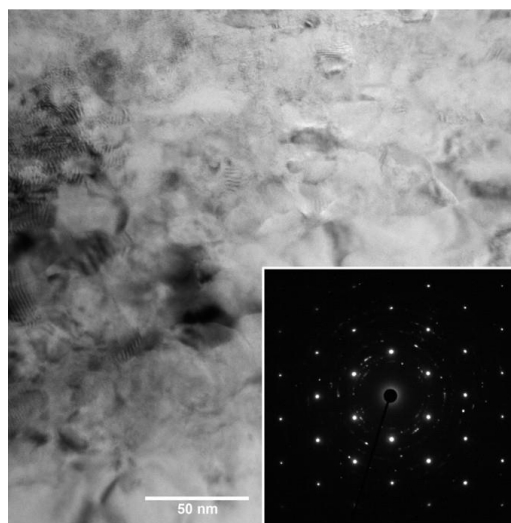
6-суретте 891-нөмірлі үлгінің металл мен жабын қабаттарының шекарасындағы жалпы BF-TEM бейнесі көрсетілген. А бөлімінде болат негізінен алынған таңдамалы аудандық дифракция (SAED) үлгісі берілген, ал В бөлімінде интерфейстен алынған SAED бейнесі көрсетілген. А бөлімінде болат [311] зона осіне бағытталған. В бөлімінде болаттың дифракциялық дақтары әлі көрінетін болса да, дифракциялық шеңберлер де анық байқалады. Бұл шеңберлер интерфейстің көпкристалды құрылымын білдіреді. Сары түспен белгіленген дифракциялық шеңберлер ZrN тор аралықтарына сәйкес келеді. Таза Zr немесе Cr фазаларына тән шеңберлер табылған жоқ.

6-суретте болат пен Cr–Zr қабаттарының арасындағы интерфейс көрсетілген. Аталмыш аймақтан алынған дифракциялық үлгілер BCC (денгіз

құрылысы) торына сай келеді, оның тор параметрі 0,461 нм-ге тең. Бұл көрсеткіштер ZrN тор аралықтарына сәйкес келеді (өлшемдері 1-кестеде берілген). Көкпен ерекшеленген 0,219 нм аралық болаттың {101} жазықтықтарына сәйкес келеді. Таза Zr немесе Cr металдарына тән дифракциялық шеңберлер табылмады.



а)



б)

6-сурет – Болат негізге тұндырылған (CrN/ZrN)/(Cr/Zr) қабаттарының TEM зерттеу нәтижелері:

BF-TEM бейнесі (Z1 – негіз зонасы, Z2 – диффузиялық қабат зонасы) және Z1 мен Z2 аймақтарынан алынған SAED үлгілері (а); Негіз-бұйым интерфейсінің BF-TEM бейнесі және оның SAED үлгісі (б)

7-суретте қабаттың төменгі бөлігінен алынған түсіндірмелі Bright field STEM (а) және HAADF STEM (б) бейнелері берілген. А және В аймақтары 4 және 5-суреттердегі EDX карталарымен сәйкес келеді. Сары жебе (в) бөліміндегі сызықтық сканерлеудің қай аймақта жүргізілгенін көрсетеді. Бұл талдау нитридті қос қабаттың қалыңдығын 1095 нм екенін анықтады.

Суперторда 40 қабат CrN/ZrN бар, олардың орташа қос қабат қалыңдығы 25 нм. Металл қабатының қалыңдығы 100 нм, ал әр қос қабаттың орташа қалыңдығы 16 нм.

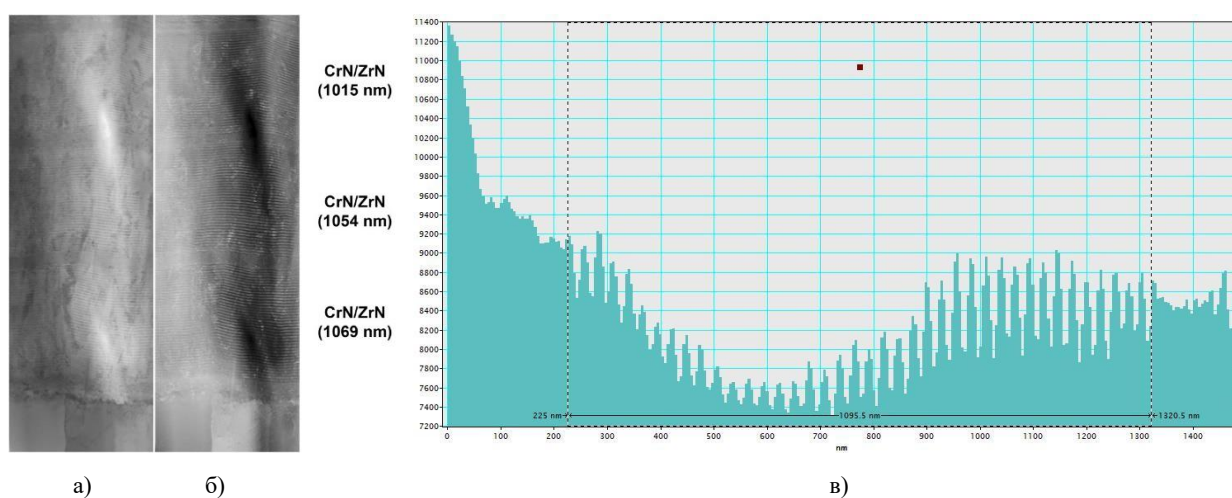
8-суретте А аймағындағы болат пен металдық қос қабаттардың интерфейсындағы EDX элементтік карта көрсетілген. Bright field (BF) және HAADF STEM суреттерінен бастапқы металдық қос қабаттың қалыңдығы шамамен 200 нм екенін байқауға болады. Бұл қабат ұсақ (< 30 нм) түйірлерден тұрады.

Элементтік картада көрсетілгендей, бұл түйірлер (Fe, Cr) және Zr қоспасынан құралған, сондай-ақ қабатта аз мөлшерде азот кездеседі. Fe мен Cr сигналдарының қиылысуы осы аймақта болаттың құрамдас элементтерінің араласқанын білдіреді, ал Zr сигналы

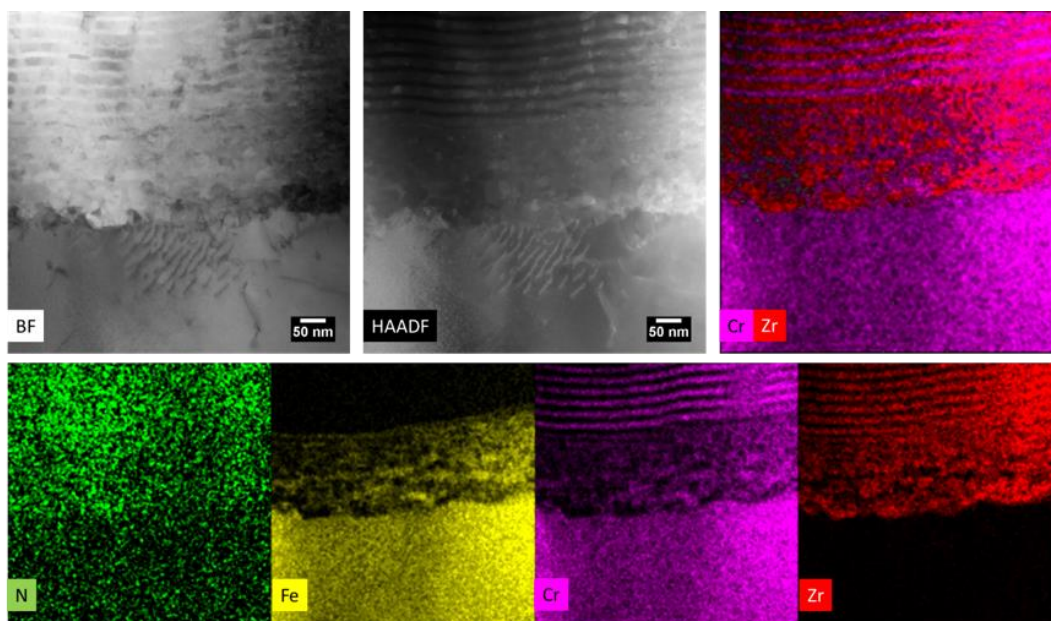
олардан кеңістіктік жағынан бөлініп тұр. Бұл жағдай 2-суреттегі дифракциялық үлгімен сәйкес келеді. Zr элементінің (Fe, Cr) болатына диффузиялануы осы аймақта Zr таралуының дәлелі болуы мүмкін.

2-кесте – Суретте көрсетілген дифракциялық үлгіден алынған d_{hkl} аралықтары

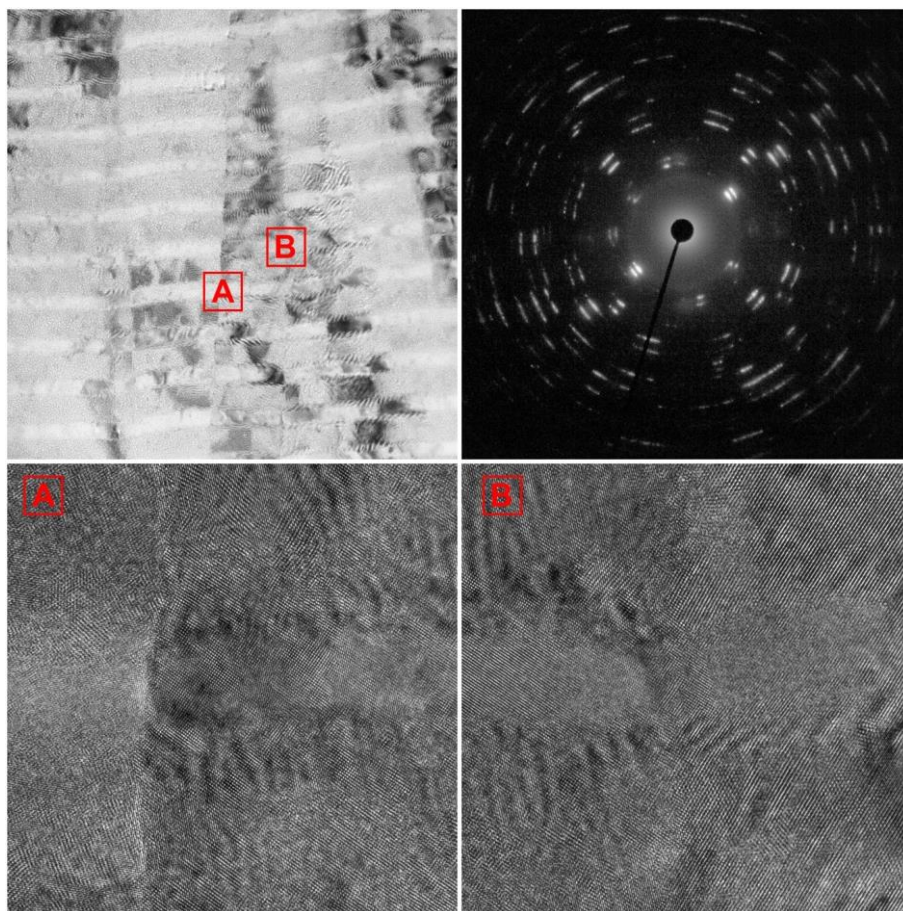
№	h	k	l	d_{hkl} , нм
1	1	1	1	0,266454
2	2	0	0	0,231
3	2	2	0	0,164935
4	3	1	0	0,146929
5	1	1	3	0,141743



7-сурет – CrN/ZrN/Cr/Zr жабынның көлденең қимасының бейнесі: BF-STEM (а); HAADF-STEM (б); интенсивтілік профилі (в)



8-сурет – Төсеніш пен жабын арасындағы бөліну шекарасының Z3 аумағынан STEM-EDS көмегімен анықталған элементтер кескіні



9-сурет – Көпқабатты (CrN/ZrN)/(Cr/Zr) жабындарының CrN/ZrN аймағының BF-TEM бейнесі және SAED үлгісі

9-суретте нитрид қабаттарының TEM бейнесі көрсетілген. Әрбір интерфейсте ZrN мен CrN арасындағы тор сәйкессіздігін көрсететін моирле жолақтары байқалады. Бұл жолақтар, мүмкін, сәйкессіздікті өтейтін дислокацияларға сәйкес келеді, дегенмен олар тікелей анықталған жоқ. Осы аймақтан алынған дифракциялық үлгі ZrN және CrN торларының құрылымымен белгіленген. Бұл қабаттардың эпитаксиялық өскенін және шамамен 9,4% тор сәйкессіздігін өтеу үшін дислокациялардың болуы қажеттігін көрсетеді.

Жабындардың микроқаттылығы (HV) HNMV-G сериялы Виккерс қаттылық сынағышы көмегімен өлшенді. Сынақ кезінде жабынға 980,7, 4,903, 9,807 және 19,61 Н мөлшеріндегі жүктемелер түсірілді. Әрбір үлгіге кемінде 10 рет өлшеу жүргізіліп, алынған нәтижелер бойынша орташа мәндер есептелді. Бұл әдіс, әсіресе, қалыңдығы аз, жұқа және жоғары қаттылыққа ие жабындардың қаттылық көрсеткіштерін анықтауға қолайлы болып табылады.

Қорытынды

Мақалада вакуумды-доғалық тұндыру әдісінің көмегімен алынған нанокөпозитті жабынның физикалық, механикалық қасиеттері, микроқұрылымы және фазалық құрамы зерттелді.

Бұл жұмыстың негізгі нәтижелері төмендегідей:

1. Вакуумды-доғалық жолмен алынған бір ғана жазықтықта көлденең орналасқан доғалы буландырығыштардың арқасында CrN, ZrN нитридтері мен Cr, Zr металдарының кезекпен алмастырылған қабаттарынан тұратын тозуға төзімді, берік CrN/ZrN/Cr/Zr негізіндегі қатты жабынды тұндыру тәсілі дайындалды.

2. Қалың қабатты нитридті және жұқа металлдың қабаттарынан құралған нанокөпозитті CrN/ZrN/Cr/Zr жабыны зерттелді. Алынған жабынның беткі қабатында және қимасы бойынша жүргізілген зерттеулер нәтижесінде Cr, Zr, CrN және ZrN қабаттарының өзара арасындағы бөліну шекараларын нақты көрсетіп, қабаттар арасының өзара тегістігі мен орналасу сапасының жоғарылығын көрсетті. Көп қабатты CrN/ZrN/Cr/Zr жабынындағы ауыспалы металдар мен нитридтердің кубтық фазалары бар поликристалды қабықшаларын микро- және наноқұрылымдық талдаулар нәтижесінен көреміз. HR-TEM әдісі арқылы жүргізілген талдау CrN/ZrN наноқабаттарындағы бөлім шекаралары маңында дислокациялардың пайда болуын және кристаллиттер арасындағы кристаллографиялық бағыттардың айырмашылығы байқалады.

3. CrN/ZrN негізіндегі көпқабатты жабындарға жүргізілген Виккерс әдісімен өлшеу нәтижесінде олардың қаттылығы 29 ГПа-ға дейін жететіні анықталды. Бұл мән бір қабатты CrN немесе ZrN жабындарымен салыстырғанда әлдеқайда жоғары екені белгілі. Сонымен қатар, микромеханикалық сынақтар нәтижесінде жабынның наноқаттылығы $H = 34$ ГПа, ал серпімділік модулі $E = 330$ ГПа деңгейінде тіркелді. Жабын бетінің кедір-бұдырына қарамастан, трибологиялық зерттеулер оның тұрақты абразивтік тозуға қарсы тұра алатынын көрсетті. Үйкеліс коэффициенті бастапқы 0,4 деңгейінен 0,18–0,2 аралығына дейін төмендегені байқалды. Бұл көрсеткіштер жабынның трибологиялық тиімділігін арттырып, жұмыс істеу мерзімін ұзартатынын көрсетеді. Тозуға төзімділіктің артуы, бір жағынан, жабынның көпқабатты және құрылымдық тұрғыдан күрделі болуымен, екінші жағынан – оның құрамында пайда болған CrSi және SiNx нанобөлшектерінің өзін-өзі майлайтын қасиетке ие болуымен түсіндіріледі. Мұндай бөлшектер үйкеліс күшін азайтып, механикалық жүктемелерге тұрақтылықты қамтамасыз етеді. Жалпы алғанда, CrN/ZrN жабындары трибомеханикалық тұрғыдан тиімділігі жоғары материал ретінде кең қолдануға қолайлы. Мұндай жабындар үйкеліс күшін азайтып, тозуға төзімділікті және икемділік деңгейін арттыруға мүмкіндік береді.

ӘДЕБИЕТТЕР / REFERENCES

1. X. Liu, Q. Yang, Z. Li, W. Yuan, Y. Zheng, Z. Cui, X. Yang, K.W.K. Yeung, S. Wu, A combined coating strategy based on atomic layer deposition for enhancement of corrosion resistance of AZ31 magnesium alloy // *Appl. Surf. Sci.* – 2018. – Vol. 434. – P. 1101–1111. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2017.11.032>
2. Q.M. Mehran, M.A. Fazal, A.R. Bushroa, S. Rubaiee, A critical review on physical vapor deposition coatings applied on different engine components, *Crit. Rev. Solid State Mater. Sci.* 43 (2018) 158e175, <https://doi.org/10.1080/10408436.2017.1320648>.
3. Holleck H., Schier V. Multilayer PVD coatings for wear protection // *Surface and Coatings Technology.* – 1995. – Vol. 76–77. – P. 328–336.
4. Contreras E., Galindez Y., Rodas M.A., Bejarano G., Gómez M.A. CrVN/TiN Nanoscale Multilayer Coatings Deposited by DC Unbalanced Magnetron Sputtering // *Surface and Coatings Technology.* – 2017. – Vol. 332. – P. 214–222.
5. F. Vaz, J. Ferreira, E. Ribeiro, L. Rebouta, S. Lanceros-Mendez, J.A. Mendes, E. Alves, P. Goudeau, J.P. Riviere, F. Ribeiro, I. Moutinho, K. Pischow, J. de Rijk, Influence of nitrogen content on the structural, mechanical and electrical properties of TiN thin films // *Surf. Coating. Technol.* – 2005. – Vol. 191. – P. 317–323. <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2004.01.033>
6. A.D. Pogrebnjak, V.I. Ivashchenko, P.L. Skrynskyy, O.V. Bondar, P. Konarski, K. Zalecki, S. Jurga, E. Coy, Experimental and theoretical studies of the physicochemical and mechanical properties of multi-layered TiN/SiC films: temperature effects on the nanocomposite structure // *Compos. B Eng.* – 2018. – Vol. 142. – P. 85–94. <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2018.01.004>
7. S.C. Vettivel, R. Jegan, J. Vignesh, S. Suresh, Surface characteristics and wear depth profile of the TiN, TiAlN and AlCrN coated stainless steel in dry sliding wear condition // *Surfaces and Interfaces.* – 2017. – Vol. 6. – P. 1–10, <https://doi.org/10.1016/j.surfint.2016.10.008>
8. S. Yip, The strongest size // *Nature.* – 1998. – Vol. 391. – P. 532–533. <https://doi.org/10.1038/35254>
9. J. Musil, Hard nanocomposite coatings: thermal stability, oxidation resistance and toughness // *Surf. Coating. Technol.* – 2012. – Vol. 207. – P. 50–65, <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2012.05.073>.
10. A.A. Bagdasaryan, A.V. Pshyk, L.E. Coy, P. Konarski, M. Misnik, V.I. Ivashchenko, M. Kempinski, N.R. Mediukh, A.D. Pogrebnjak, V.M. Beresnev, S. Jurga, A new type of (TiZrNbTaHf)N/Mon nanocomposite coating: microstructure and properties depending on energy of incident ions // *Compos. B Eng.* – 2018. – Vol. 146. – Art. 132e144. <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2018.04.015>
11. S. Labdi, P. Houdy, P. Psyllaki, M. Jeandin, Elaboration and characterization of Ti and TiN thin films and multilayers for hard coating applications // *Thin Solid Films.* – 1996. – Vol. 275. – P. 213–215. [https://doi.org/10.1016/00406090\(95\)07046-X](https://doi.org/10.1016/00406090(95)07046-X)
12. Lousa, J. Romero, E. Martinez, J. Esteve, F. Montalà, L. Carreras, 'Multilayered chromium/chromium nitride coatings for use in pressure diecasting' // *Surf. Coatings Technol.* – 2001. – Vol. 146–147. – P. 268–273. [https://doi.org/10.1016/S0257-8972\(01\)01476-1](https://doi.org/10.1016/S0257-8972(01)01476-1)
13. D.J. Li, F. Liu, M.X. Wang, J.J. Zhang, Q.X. Liu, Structural and mechanical properties of multilayered gradient CrN/ZrN coatings // *Thin Solid Films.* – 2006. – Vol. 506–507. – P. 202–206. <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2005.08.031>
14. Z.G. Zhang, O. Rapaud, N. Allain, D. Mercs, M. Baraket, C. Dong, C. Coddet, Microstructures and tribological properties of CrN/ZrN nanoscale multilayer coatings // *Appl. Surf. Sci.* – 2009. – Vol. 255. – P. 4020–4026. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2008.10.075>
15. Maksakova O.V., Webster R.F., Tilley R.D., Ivashchenko V.I., Postolnyi B.O., Bondar O.V., Takeda Y., Rogoz V.M., Sakenova R.E., Zukowski P.V., Opielak M., Beresnev V.M., Pogrebnjak A.D. Nanoscale Architecture of (CrN/ZrN)/(Cr/Zr) Nanocomposite Coatings: Microstructure, Composition, Mechanical Properties and First-Principles Calculations // *Journal of Alloys and Compounds.* – 2020. – Vol. 831. – P. 154808-1-154808-15
16. Bondar O.V., Pogrebnjak A., Takeda Yo., Postolnyi B., Zukowski P., Sakenova R.E., Postolnyi B. Structure and Properties of Combined Multilayer Coatings Based on Alternative Triple Nitride and Binary Metallic Layers // *NAP2018, 2018 IEEE 8th Int. Conf. "Nanomaterials Applications and Properties, Zatoka, Ukraine.* – 2018. – Vol. 3. – P. 03TFNMC73-1- 03TFNMC73-5.

НАНОРАЗМЕРНАЯ АРХИТЕКТУРА НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ПОКРЫТИЙ НА ОСНОВЕ (CrN/ZrN)/(Cr/Zr)

Р. Е. Сакенова^{1*}, А. Д. Погребняк², Л. С. Баймолданова¹

¹ *Восточно-Казахстанский университет им. Сарсена Аманжолова, Усть-Каменогорск, Казахстан*

² *Сумский государственный университет, Сумы, Украина*

* E-mail для контактов: sakenovarim@gmail.com

Исследованы микроструктура и механические свойства периодически чередующегося многослойного наноструктурированного покрытия, состоящего из чередующихся металлических нитридов (CrN/ZrN) и чистых металлов (Cr/Zr). Была получена специально разработанная многослойная структура, включающая в одном модуляционном периоде 7 металлических и 40 нитридных слоев. Толщина каждого металлического слоя составляла 16 нм, а толщина нитридных слоев – 25 нм. Для объяснения механизма повышения прочности покрытия были проведены расчёты на основе первых принципов, опираясь на полученные экспериментальные данные.

Результаты микроструктурных исследований показали преобладание кубических фаз CrN и ZrN с чётко выраженной ориентацией по направлениям (200) и (111)/(200). Несмотря на наноразмерные размеры нанослоев и нанокристаллов, на границах между слоями CrN и ZrN наблюдались дислокации и структурные нарушения кристаллических плоскостей.

Исследуемая многослойная структура продемонстрировала высокие механические свойства: максимальную твёрдость 34 ГПа, приведённый модуль упругости 330 ГПа, предел упругой деформации до пластической деформации 0,1, а также сопротивление пластической деформации 0,36.

Указанные высокие характеристики были достигнуты благодаря уникальной многослойной (внутренней многослойной) архитектуре покрытия и его специфическим структурным особенностям.

Ключевые слова: фазовый состав, нитриды, микроструктура, многослойное покрытие, дислокации, твердое покрытие.

NANOSCALE ARCHITECTURE OF NANOSTRUCTURED COATINGS BASED ON (CrN/ZrN)/(Cr/Zr)

R. E. Sakenova^{1*}, A. D. Pogrebnyak², L. S. Baimoldanova¹

¹ *Sarsen Amanzholov East Kazakhstan University, Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan*

² *Sumy State University, Sumy, Ukraine*

* E-mail for contacts: sakenovarim@gmail.com

The microstructure and mechanical properties of a periodically alternating multilayered nanostructured coating composed of alternating metal nitrides (CrN/ZrN) and pure metals (Cr/Zr) were investigated. A specially designed multilayer structure was fabricated, consisting of 7 metal and 40 nitride layers within one modulation period. The thickness of each metal layer was 16 nm, while the thickness of each nitride layer was 25 nm. To explain the mechanism of increased coating strength, first-principles calculations were conducted based on the obtained experimental results.

Microstructural studies revealed that cubic CrN and ZrN phases predominate, clearly oriented along the (200) and (111)/(200) crystallographic directions. Despite the nanoscale dimensions of the nanolayers and nanocrystals, dislocations and structural disorder of crystal planes were observed at the interfaces between CrN and ZrN layers.

The investigated multilayer structure demonstrated outstanding mechanical properties, including a maximum hardness of 34 GPa, a reduced elastic modulus of 330 GPa, an elastic strain limit before plastic deformation of 0.1, and a plastic deformation resistance of 0.36.

These superior properties were achieved as a result of the unique multilayered (internal multilayer) architecture of the coating and its specific structural features.

Keywords: phase composition, nitrides, microstructure, multilayer coating, dislocation, hard coating.

<https://doi.org/10.52676/1729-7885-2025-4-150-158>

УДК 661.666.411

МИКРОТОЛҚЫНДЫ РАЗРЯДТАҒЫ МЕТАННАН ЖАСАЛҒАН КӨМІРТЕКТІҢ ПЛАЗМОХИМИЯЛЫҚ СИНТЕЗІ

М. К. Скаков¹, А. Ж. Миниязов², И. А. Соколов^{2,3}, Т. Р. Туленбергенов^{2,3},

А. А. Агатанова^{2,3*}, А. А. Сабыртаева², Б. Е. Бекмагамбетова²

¹ «Қазақстан Республикасының Ұлттық ядролық орталығы» РМК, Курчатов, Қазақстан

² ҚР ҰАО РМК «Атом энергиясы институты» филиалы, Курчатов, Қазақстан

³ Shakarim University, Семей, Қазақстан

* Байланыс үшін E-mail: agatanova@nnc.kz

Бұл жұмыста атмосфералық қысым кезінде микротолқынды разрядта метан пиролизі әдісімен синтезделген көміртегі материалдарын кешенді зерттеу нәтижелері келтірілген. Микротолқынды разряд қуатының әсерінен алынған көміртегінің морфологиялық, фазалық және текстуралық сипаттамалары зерттелді. Сканерлеуші электронды микроскопия (СЭМ) көмегімен қуаттың 0,6-дан 1,4 кВт-қа дейін алынған үлгілер бөлшектердің орташа мөлшерінің ~20,2 мкм-ден ~10,4 мкм-ге дейін азаюына және дисперсті құрылымның пайда болуына әкелетіні анықталды. Рентген фазалық талдау (РФТ) көміртектің аморфты турбостраттық құрылымнан процесс температурасының ұлғаюымен неғұрлым реттелген графит тәрізді фазаға ауысатынын көрсетті. Азотты төмен температуралық адсорбциялау әдістерімен (ВЕТ және ВЈН) көміртегі материалдары мезокеуекті құрылыммен сипатталатыны, ал меншікті беті мен көздер көлемінің максималды мәндері магнетронның минималды қуаты кезінде (тиісінше 628 м²/г және 5,04 см³/г) байқалатыны көрсетілген. Алынған нәтижелер аса жоғарғы жиілікті плазма (АЖЖ) плазма қуатының көміртегі материалдарының құрылымын және функционалдық сипаттамаларын басқарудағы шешуші рөлін көрсетеді, бұл оларды энергияның катализінде, сорбциясында және жинақталуында пайдалану перспективаларын ашады.

Түйін сөздер: метан пиролизі, микротолқынды плазма, көміртекті материалдар, құрылымдық қасиеттері, BET, XRD, SEM.

КІРІСПЕ

Бүгінгі таңда сутегі көміртекті-бейтарап энергетикаға көшудің негізгі элементтердің бірі ретінде қарастырылады. Сутегі энергетикасына қызығушылықтың өсуі көмірқышқыл газының шығарындыларын азайту және энергетикалық қауіпсіздікті арттыру жөніндегі мақсаттарға қол жеткізу қажеттілігіне негізделген [1]. Сутекті отын ретінде пайдаланудың басты қиындығы оның табиғатта таза түрінде аз кездесуі болып саналады. Бұл тұрғыда сутегі өндірісінің ауқымды және экологиялық қауіпсіз технологияларын дамыту ерекше маңызды.

Декарбонизациялау бойынша жаһандық күш-жігер шеңберінде Қазақстан да 2060 жылға қарай көміртегі бейтараптығына қол жеткізуге ұмтыла отырып, белсенді қадамдар жасауда. 2023 жылғы ақпанда экономиканың негізгі салаларын төмен көміртекті дамытуға және декарбонизациялауға көшуді көздейтін «Қазақстан Республикасының 2060 жылға дейінгі көміртегі бейтараптығына қол жеткізу стратегиясы» қабылданды [2].

СО₂ шығарындыларының төмен деңгейі бар әдістердің ішінде су электролизі мен метан пиролизі аса қызығушылық тудырады [3]. Дәстүрлі бу риформинінен айырмашылығы, метан пиролизі көмірқышқыл газының эмиссиясымен қатар жүрмейді, ал процестің қорытынды өнімдері «көгілдір» сутегі мен қатты көміртек болып табылады.

Метан пиролизін іске асырудың неғұрлым перспективалы тәсілдерінің бірі микротолқынды плазманы пайдалану болып табылады. Мұндай технология тиімділігі жоғары жергілікті қыздыруға, метанның едәуір дәрежеге айналуына және энергетикалық шығындарды оңтайландыруға қол жеткізуге мүмкіндік береді. Процесті микротолқынды разрядты пайдалана отырып атмосфералық қысым жағдайында жүргізу оның табиғи газдан сутегі және көміртекті наноматериалдар алу үшін қолданбалы қабілеттілігін растайды [4–7]. Пайда болатын көміртегінің соңғы сипаттамалары температура, плазма түзетін газдың түрі, газ шығыны, реактордың конструкциясы, қыздыру тәсілі, сондай-ақ әртүрлі катализаторларды қолдану сияқты реакция ағымының параметрлеріне байланысты [8].

Көміртек бірегей физикалық-химиялық қасиеттерге ие бола отырып, бірқатар технологиялық бағыттарда неғұрлым қажетті функционалдық материалдардың бірі болып табылады. Химия өнеркәсібінде ол катализаторлар құрылымының тасымалдаушысы ретінде кеңінен қолданылады [9], атап айтқанда, аммиак өндірісінде. Мұнай-химияда көміртек көмірсутектерді өндеудің тиімділігін арттыра отырып, каталикалық крекинг және риформинг реакцияларында белсенді қолданылады [10]. Энергетикада ол синтез-газдармен жұмыс істегенде катализатор және сорбент ретінде пайдаланылады [11]. Тиімді катализаторлық тасымалдағыштың негізгі қасиеттері реагент-

термен қарқынды өзара әрекеттесуді қамтамасыз ететін үлкен меншікті бет пен дамыған кеуектілік болып табылады. Сонымен қатар, көміртекті материалдар фармацевтикалық субстанциялар өндірісінде, химиялық заттарды тазарту жүйелерінде, металлургиялық қалпына келтіру және цементтеу процестерінде қолданылады [12].

Осылайша, бұл жұмыс магнетронның қуаты мен температуралық режимнің өзгеруі кезінде микротолқынды разряд жағдайында метанның пиролизі нәтижесінде алынатын көміртегінің қасиеттерін зерттеуге бағытталған. Бетінің ауданын анықтауға және синтезделген үлгілердің микроқұрылымдық сипаттамаларын талдауға ерекше көңіл бөлінеді. Алынған нәтижелер процесс параметрлерін оңтайландыруға және метанның микротолқынды пиролизі кезінде қалыптасатын көміртекті материалдарды қолдану салаларын кеңейтуді негіздеуге мүмкіндік береді.

1 ЗЕРТТЕУ ӘДІСТЕРІ

1.1 Эксперименттік қондырғы

Эксперименттік база ретінде ҚР ҰЯО РМК «Атом энергиясы институты» филиалының Сутегі энергетикасы жөніндегі технологиялық құзыреттер орталығында әзірленген микротолқынды разрядтағы метанды пиролиздеу әдісімен сутегі мен көміртекті алу тәсілін қолданбалы зерттеулер мен пысықтауға арналған ПМ-6 қондырғысы пайдаланылды [13, 14]. Қондырғы құрамына қуаты 6 кВт-қа дейін жететін, 2,45 ГГц жиілікте жұмыс істейтін микротолқынды генератор, WR340 толқынжүргіш, диаметрі 30 мм кварц түтігінен жасалған реакциялық камера, пайдаланылған газдарды жою және көміртекті ұстау жүйесі кіреді. Қондырғының жалпы көрінісі мен сұлбасы 1-суретте көрсетілген.

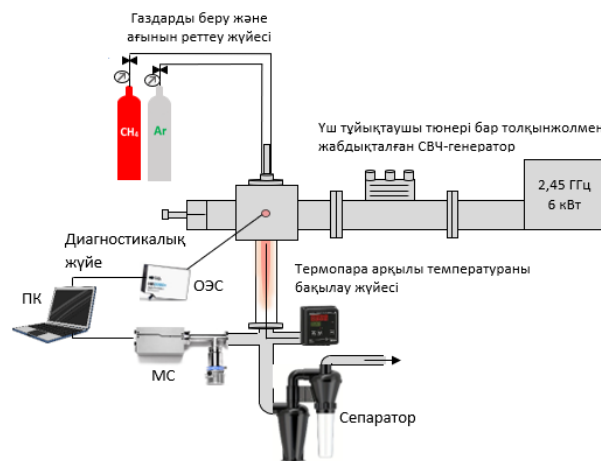
Реакциялық камера ретінде жоғары температураға төзімді, химиялық инертті және күрт температуралық градиенттерге төзе алатын кварц түтігі пайдаланылды. Камера қабырғаларының қызып кетуін болдырмау және оның орталық бөлігінде плазмалық разрядты тұрақтандыру үшін газ қоспасын беру құйын ағыны түрінде жүзеге асырылды. Метанның плазмохимиялық ыдырауы жүретін аймақ кварцты түтіктің толқын өткізгішпен қиылысу аймағында қалыптасты.

Жұмыс ортасы метан мен аргонның қоспасы болды, онда аргон разрядты іске қосу мен ұстап тұруды қамтамасыз ете отырып, иондаушы газ функциясын орындады. Өзінің химиялық инерттілігінің арқасында аргон ыдырау реакцияларын бастамалауға ықпал ете отырып, энергетикалық процестерге қатысуға қабілетті. Жоғары энергиялы аргонның қозғалған атомдары органикалық қосылыстар молекулаларының ыдырауын жандандырады. Газ қоспасы реакциялық аймаққа газ шығынын өлшегішті пайдалана отырып берілді: метанның шығыны 9 ± 1 л/сағ, ал аргон 1182 ± 10 л/сағ. Бұл параметрлер плазмалық жүйенің тұрақты жұмыс істеуін қамтамасыз етті.

Реактордағы температуралық режимді бақылау ақпараттық-өлшеу кешеніне қосылған К типті ХА (хромель-алюмель) термопараны пайдалана отырып жүзеге асырылды. К типті термопараның өлшеу диапазоны шамамен -200 °С-тен $+1300$ °С-қа дейін. Бұл термопаралар кең температуралық ауқымды сенімді бақылауға мүмкіндік береді.



а)



ә)

1-сурет – ПМ-6 қолданбалы зерттеулерге арналған қондырғының а) сыртқы көрінісі мен ә) сұлбасы

Эксперименттер магнетрон қуаты 0,6 кВт, 1,0 кВт және 1,4 кВт болатын аргон және метан газдарының қоспасының атмосфералық қысымы кезінде жүргізілді, бұл әртүрлі температуралық режимдерге 395 ± 10 °С, 545 ± 10 °С, 705 ± 12 °С сәйкес келді. Көміртегі материалының үлгілері қуат деңгейіне байланысты С-1 (0,6 кВт), С-2 (1,0 кВт) және С-3 (1,4 кВт) ретінде белгіленген. Әрбір эксперименттің ұзақтығы шамамен 20 минутты құрады.

1.2 Көміртекті талдау әдістері

Көміртегі үлгілерінің микроқұрылымы сканерлейтін электрондық микроскопияны (SEM) қолдану арқылы зерттелді. Электр өткізгіштігін қамтамасыз ету үшін сынамалар мыс жабысқақ таспаға бекітілді.

Түсірілім қайталама электрондар детекторын (SE) пайдалана отырып, жоғары вакуум жағдайында 15 кВ үдеткіш кернеуінде жүргізілді. Морфологияны және бөлшектердің өлшемдері бойынша таралуын сандық бағалау микроскопиялық бейнелерді автоматтандырылған талдауды қамтамасыз ететін TM4000 бағдарламалық жасақтама көмегімен орындалды.

Зерттелетін материалдардың фазалық құрамы D6 PHASER дифрактометрін пайдалану арқылы рентгендік дифрактометрия (XRD) әдісімен айқындалды. Өлшеулер құрамында көміртегі бар заттарды талдау үшін стандартты Cu K α ($\lambda = 0,15418$ нм) монохроматикалық сәулеленуде орындалды. Деректер 0,013° қадаммен және нүктеге 0,3 с жинақтау уақытымен 15°-тен 100°-ке дейін 2 θ бұрыш диапазонында жиналды. Нәтижелердің сенімділігін арттыру үшін үлгінің 5 айн/мин жылдамдықпен айналуы пайдаланылды. Сканерлеу 40 кВ және 30 мА жұмыс параметрлері кезінде θ –2 θ режимінде жүргізілді. Дифрактограммаларды талдау DIFFRAC.EVA бағдарламалық кешенінің көмегімен PDF-4/Axiom 2025 деректер базасын қолдана отырып орындалды, ал фазаларды сәйкестендіру C эталондық карточкасы (PDF 04-020-43-54) бойынша жүргізілді.

Көміртегінің меншікті бетін және кеуекті құрылымын талдау V-sorb 2800 P қондырғысын пайдалана отырып, азотты төмен температуралық адсорбциялау әдісімен жүргізілді [15] стандартқа сәйкес бетінің меншікті ауданын ($S_{\text{бет}}$) бағалау P/P_0 салыстырмалы қысым диапазонында 0,05-тен 0,35-ке дейін жүргізілді, адсорбциялық газ ретінде азот қолданылды, талдау сұйық азоттың қайнау температурасында жүргізілді (–195,8 °C). Кеуек көлемін ($V_{\text{ВЛН}}$) және олардың өлшемі бойынша таралуын ($D_{\text{ВЛН}}$) талдау [16] әдістемесіне сәйкес орындалды.

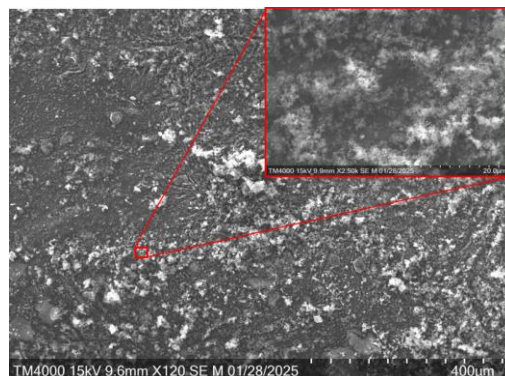
2 НӘТИЖЕЛЕР ЖӘНЕ ТАЛҚЫЛАУ

2.1 SEM талдау

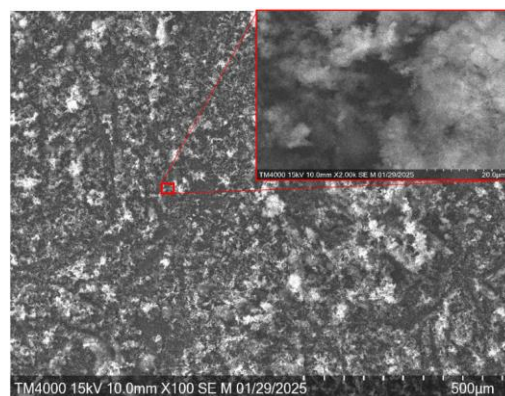
Көміртекті бөлшектердің микроқұрылымдық талдауы сканерлеуші электронды микроскопия әдісімен алынған суреттер негізінде жүргізілді. Түсіру $\times 100$ және $\times 2,5k$ үлкейту кезінде жүргізілді. 2-суреттегі $\times 100$ үлкейту кезінде алынған аморфты көміртекті материалдарға тән талшықты-кеуекті құрылым анықталған. Бөлшектер кездейсоқ тоқылған элементтерден тұратын борпылдақ, губка тәрізді матрицаны құрайды, бұл айқын кеуектілікті көрсетеді. Сонымен қатар, кейбір жерлерде бөлшектердің жергілікті агрегациясы байқалды. Әр үлгінің үстіңгі оң бұрышында 2,5k үлкейту кезіндегі мамық тәрізді морфологиясы көрсетілген.

Микротолқынды разряд қуатының өзгеруі көміртегі бөлшектерінің морфологиялық сипаттамаларына және мөлшерлік таралуына айқын әсер етеді. Салыстырмалы түрде төмен қуатта (0,6 кВт), C-1 үлгісінде өлшемі бірнеше микрометрден ондаған микрометрге дейінгі бөлшектерді қамтитын ірі агрегаттар

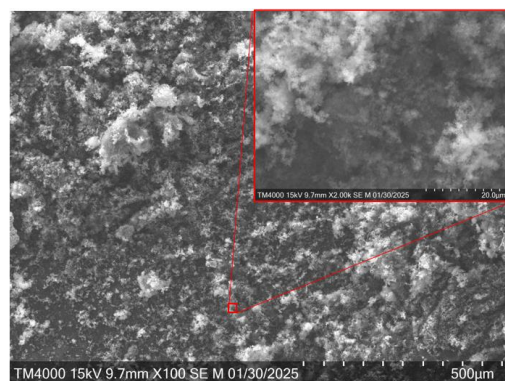
қалыптасады, бұл реакция өтуінің төмен температурасына байланысты болуы мүмкін. Бұл жағдайда бөлшектердің орташа диаметрі $\sim 20,2$ мкм құрады.



а) C-1 үлгісі



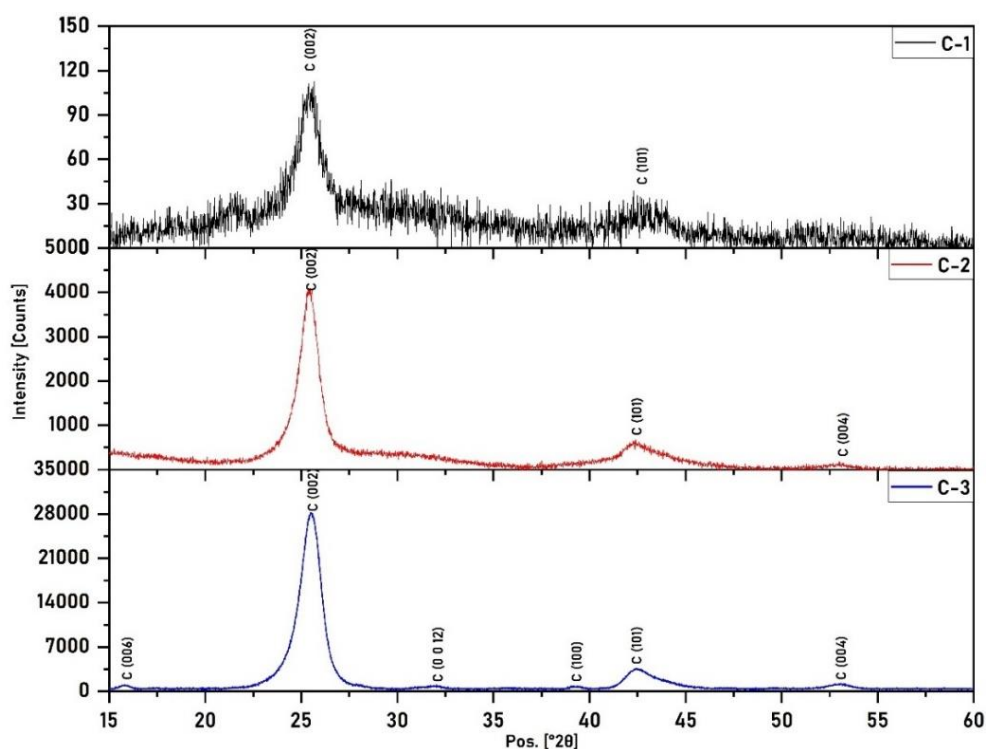
ә) C-2 үлгісі



в) C-3 үлгісі

2-сурет – ПМ-6 қондырғысында алынған көміртегі үлгілерінің SEM бейнелері

Қуаттың 1,0 кВт-қа дейін көтерілуі (C-2 үлгісі) бөлшектердің біркелкі таралуына және агрегация дәрежесінің төмендеуіне әкеледі. Бөлшектердің орташа мөлшері $\sim 14,9$ мкм дейін кішірейеді. Қуаттың 1,4 кВт-қа дейін одан әрі ұлғаюы кезінде (C-3 үлгісі) дисперсті құрылымның едәуір дамуы байқалады, бұл метан пиролизі процестерінің күшеюін және орташа мөлшері шамамен 10,4 мкм болатын ұсақ көміртегі бөлшектерінің пайда болуын көрсетеді.



3-сурет – C-1, C-2, C-3 үлгілерінің 15–60° 2θ бұрыштық диапазонында алынған дифрактограммаларының қабаттаса салынған көрінісі

Жалпы, морфологиядағы айырмашылықтар бөлшектердің нысаны мен мөлшерінде неғұрлым айқын көрінеді. Мысалы, қуаттылығы төмен болған кезде ірі агрегаттар басым, ал қуаттылықтың артуы неғұрлым дисперсті жүйенің қалыптасуына және наномөлшемді құрылымдар үлесінің ұлғаюына ықпал етеді, бұл синтез процесін бақылаудың жоғары дәрежесін көрсетеді.

2.2 XRD талдау

3-суретте көрсетілген дифракциялық суреттерді қабаттастыру арқылы үш үлгінің дифрактограммалары алынды және талданды.

Көміртегінің үлгілері үшін графитке (C-2H) сәйкес келетін бұрыштары 15,8°, 25,5°, 31,8°, 39,3°, 42,5° және 52,9° 2θ кезінде максимумдары бар рефлексдер тіркелген. C фазасы (Graphite-2H) $a=b=2,5714 \text{ Å}$, $c=6,8382 \text{ Å}$ (PDF 04-020-43-54) параметрлері бар гексагоналды торлармен (кеңістіктік топ $P6_3/mmc$) сипатталады. Графиттің гексагоналды торының кристаллографиялық жазықтықтарына сәйкес келетін эксперименттік анықталған жазықтықаралық қашықтық: $d_{006}=5,58 \text{ Å}$, $d_{002}=3,48 \text{ Å}$, $d_{0012}=2,81 \text{ Å}$, $d_{100}=2,28 \text{ Å}$, $d_{101}=2,12 \text{ Å}$, $d_{004}=1,72 \text{ Å}$.

C-1 үлгісі мөлдір текстураға ие және ұшпа компоненттердің жоғары болуымен сипатталады, бұл өз кезегінде дифрактограммадағы доға тәрізді сызыққа негізделген. C-1 үлгісінің дифракциялық кескіні турбостатты қаттылығы айқын аморфты көміртекке сәйкес келеді [17]. Қысықтың мұндай пішіні бір-біріне қатысты ретсіз орналасқан графен тәрізді

қабаттардан тұратын турбостатты құрылымы бар көміртектер үшін типтік болып табылады. Турбостатты материалдарда қабаттар арасында алыс тәртіп болмайды, бұл шыңның кеңеюіне және жылжуына әкеледі. Бұл сондай-ақ айқын қосымша дифракциялық рефлексдердің жоқтығын түсіндіреді. [18–20].

Көміртегі C-2 үлгісінің дифракциялық кескіні 26°≈2θ аумағындағы тар, неғұрлым айқын шыңын және 44°≈2θ шамасындағы шыңын көрсетеді, қарқындылығы едәуір жоғары (4000 есептеу), бұл кристалдылықтың орташа дәрежесін көрсетеді. Турбостаттық бар, бірақ аз дәрежеде. 40–50°≈2θ диапазонында әлсіз қосымша шыңдар байқалады, бұл ішінара кристалдануды көрсетеді. Қарқындылық C-1 үлгісімен салыстырғанда ұлғайды. C-2 үлгісінің құрылымы ішінара кристалданған көміртек ретінде сипатталады [1–3].

C-3 дифракциялық суретте материалдың жоғары кристалдылығы көрінеді. 2θ≈26° (002) позициясындағы шыңы тар және қарқынды, бұл реттіліктің жоғары деңгейін көрсетеді. Қосымша көміртегінің шыңдары және әлсіз цементит шыңы 2θ≈43–45° (100) жақсы көрінеді. Бұл құрамында темір көміртегі фазасы аз жақсы кристалданған графиттің қалыптасқанын көрсетеді.

1-кестеде C-2 және C-3 үлгілері үшін Уильямсон-Холл әдісімен тордың параметрлері мен микроқұрылымдық сипаттамаларының есептері берілген. Графиттің гексагоналды тордың эталондық параметрлері: $a=b=2,46 \text{ Å}$, $c=6,7 \text{ Å}$.

С-1 үлгісі аморфты құрылымға ие болғандықтан, ол туралы кестеде ақпарат жоқ.

С-2 үлгісінде тор параметрлерінің $a \approx 2,64 \text{ \AA}$ және $c \approx 6,95 \text{ \AA}$ дейін кеңеюі байқалады. Мұндай кеңею турбостратты көміртекке тән болып саналады, өйткені с осі бойында қабатаралық реттіліктің бұзылуы және қабаттар арасындағы бағдарсыздықтың жоғары деңгейі орын алады. Сондай-ақ, бұл орташа кристаллит өлшемінің салыстырмалы түрде аз мәнімен расталады (63,28 нм).

1-кесте – Көміртек үлгілерінің тор параметрлері мен микроқұрылымдық сипаттамалары

Үлгі	Фаза	Тор параметрі (a, Å)	Тор параметрі (c, Å)	Микродеформация ϵ	Кристаллиттердің орташа мөлшері D, нм
С-2	С (графит)	2,64	6,95	0,0027	63,28
С-3	С (графит)	2,45	6,62	0,0016	85,17

С-3 үлгісінде $a \approx 2,45 \text{ \AA}$ және $c \approx 6,62 \text{ \AA}$ параметрлері бар жақсы қалыптасқан гексагоналдық тордың белгілері байқалады, бұл тамаша графиттің мәндеріне жақын. Бұл үлгі дифракциялық шындықтың жоғары қарқындылығы мен симметриясын, сондай-ақ кристаллдардың едәуір орташа мөлшерін (шамамен 85 нм) көрсетеді, бұл дамыған кристалды аудандардың бар екенін көрсетеді.

Микродеформацияның мәні техникалық көміртегінің кристалды торының ақаулық дәрежесі мен кернеулі жағдайындағы айырмашылықтарды көрсетеді. С-3 үлгісі үшін микродеформация 0,0016 құрайды, бұл ақаулардың орташа санын және графен қабаттарының салыстырмалы тұрақты орналасуын көрсетеді. Мұндай мәндер қабатты құрылым қабатаралық қашықтықта да, бағдарда да тұрақтылықты сақтайтын жартылай кристалданған техникалық көміртекке тән.

Керісінше, С-2 үлгісі микродеформацияның айтарлықтай жоғары мәнін көрсетеді – 0,0027. Бұл серпінді кернеулер, ақаулардың жоғары тығыздығы, сондай-ақ графен қабаттарының күшті дезориентациясы мен бұрмалануы туралы куәландырады. Жоғары микродеформация үш өлшемді қалауы бұзылған көміртегі материалдарының сипатты белгісі болып табылады және құрылымда алыс тәртіптің жоқтығын көрсетеді. Осылайша, С-2 үлгісіндегі микродеформацияның өсуі С-3 үлгісімен салыстырғанда олардың неғұрлым аморфты сипатын растайды.

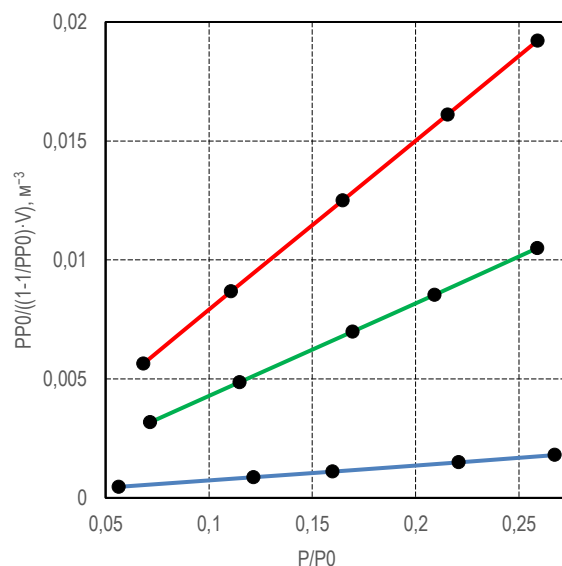
Жүргізілген талдау нәтижелері бойынша реакция температурасына байланысты көміртегі әртүрлі құрылымдық формаларды қалыптастыратыны анықталды. Бұл үлгілерде кристалдық құрылымнан басқа көміртегінің өтпелі формалары тіркелген.

Осылайша, температураның жоғарылауымен алынған материалдағы көміртегі қабаттары үш өлшемді ретпен тұрақты құрылымды құрайтыны анықталды, бұл кристалдық тордың пайда болуына әкеледі.

2.3 ВЕТ және ВЈН талдау

ВЕТ және ВЈН төмен температуралы азотты адсорбциялау әдістерін қолдана отырып, көміртек-материалдардың негізгі текстуралық сипаттамалары, соның ішінде меншікті беткі аудан, кеуек көлемі және олардың мөлшері бойынша таралуы анықталды. Талдау жүргізер алдында үлгілер $120 \text{ }^\circ\text{C}$ температурада 2 сағат бойы вакуумда өңделіп, дегазация кезеңінен өтті. Бұл беткі ластанулар мен қалған адсорбцияланған газдарды жою мақсатында жүргізілді.

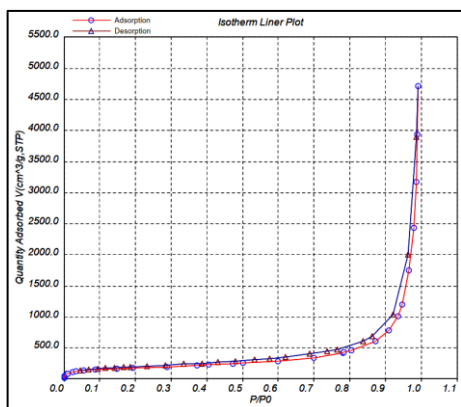
Зерттелетін үлгілердің әрқайсысы үшін ВЕТ әдісі бойынша төрт өлшем және ВЈН әдісі бойынша үш өлшем жасалды, бұл қайталанатын және статистикалық сенімді деректерді алуға мүмкіндік берді. Алынған адсорбция изотермалары бетінің ауданын есептейтін ВЕТ әдісі бойынша графиктер салу үшін пайдаланылды. Нәтижелер 4-суретте көрсетілген.



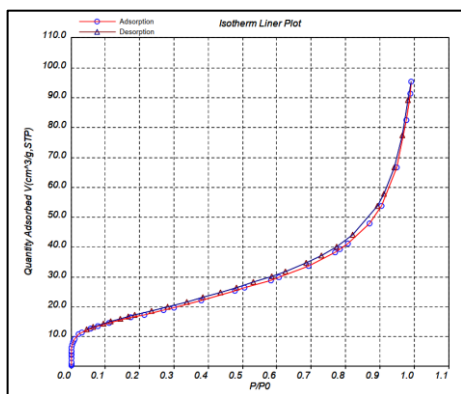
4-сурет – Үлгілердің ВЕТ талдау графиктері

Келтірілген график адсорбцияланған газ көлемінің оның салыстырмалы қысымына тәуелділігі берілген. Алынған деректерге сәйкес, қысымның өсуімен үлгілердің бетінде сорбцияланатын азот көлемінің ұлғаюы байқалады, бұл $S_{\text{ВЕТ}}$ әдісімен меншікті бетті есептеу үшін негізі болып табылады. График барлық кезеңдерде адсорбцияның тұрақты сипатын көрсетеді.

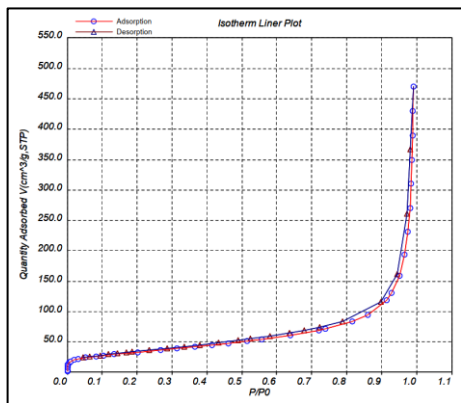
Материалдардың кеуекті құрылымын талдау үшін ВЈН әдісімен түсіндірілетін адсорбция және десорбция изотермалары құрылды. Кеуектердің көлемі және олардың өлшемдері белгіленген температура және салыстырмалы қысымның әртүрлі мәндері кезінде адсорбцияланған газ көлемінің негізінде айқындалған. Барлық алынған графиктер өзара және әртүрлі үлгілер бөлінісінде ұқсас сипаттамаларды көрсетеді. С-1, С-2 және С-3 үлгілері үшін азот адсорбциясының изотермалары 5-суретте келтірілген.



а) C-1 үлгісі



ә) C-2 үлгісі



в) C-3 үлгісі

5-сурет – Адсорбция және десорбция изотермаларының графиктері

5-суретте үш үлгідегі адсорбциялық және десорбциялық гистерезис ілмектері берілген. IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry) [21] классификациясына сәйкес үш график IV типті изотерма үшін гистерезис ілмегінің типтік сипаттамаларын көрсетеді. Бұл бір уақытта мезокеуектер мен үлкен кеуектер болатын кеуекті материалдарға тән. Бұл құрылым жоғары қысымда газдың үлкен көлемін тиімді адсорбциялауға, сондай-ақ қысым төмендеген кезде оны оңай десорбциялауға мүмкіндік береді.

Алынған үлгілердің изотермалық графиктері бойынша (5-сурет) гистерезистерде адсорбция мен десорбция қисықтарының қашықтығы аз және сәйкес келмейтіні байқалады. Бұл құбылыс үлгінің кеуектерінде адсорбцияланған газдың ұсталған молекулаларынан туындайды. Сондай-ақ бұл үлгілердің біртекті кеуекті құрылымын куәландырады.

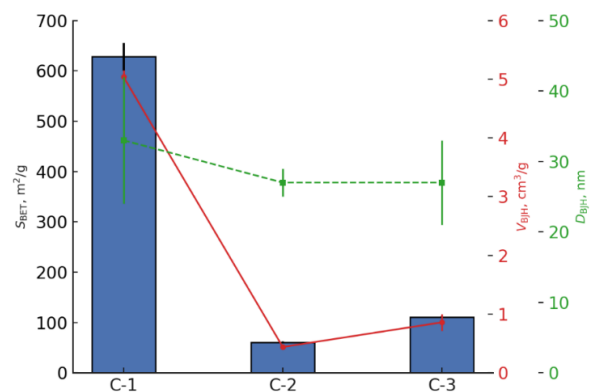
2-кестеде орташа сенімділік интервалымен ВЕТ және ВЛН талдауларын есептеудің орташаланған нәтижелері келтірілген.

2-кесте – Кеуектердің меншікті аудан мен параметрлерін анықтаудың эксперименттік деректері

№	Үлгі	АЖЖ қуаты, кВт	Меншікті беткі аудан $S_{ВЕТ}$, м²/г	Кеуек көлемі $V_{ВЛН}$, см³/г	Кеуектерінің өлшемі (ені) $D_{ВЛН}$, нм
1	C-1	0,6	628±28	5,04±0,11	33±9
2	C-2	1,0	60±2	0,44±0,03	27±2
3	C-3	1,4	111±2	0,86±0,14	27±6

Есептеулер нәтижелері бойынша үлгілерде мезокеуектер басым (кеуектердің өлшемі 2 нм-ден 50 нм дейін). Эксперименттік мәндер диапазоны сенімділік интервалында орналасқан.

6-суретте $S_{ВЕТ}$, $V_{ВЛН}$, $D_{ВЛН}$ АЖЖ разряд магнетронының қуатына тәуелділіктерінің жиынтық диаграммасы көрсетілген.



6-сурет – $S_{ВЕТ}$, $V_{ВЛН}$, $D_{ВЛН}$ АЖЖ разряд қуатқа тәуелділік диаграммасы

Көміртек үлгілерін талдау олардың кеуекті құрылымының параметрлері АЖЖ разрядтың қуатына байланысты екенін көрсетті. C-1 (0,6 кВт) үлгісі меншікті беттің максималды мәндерін (628±28 м²/г), кеуек көлемін (5,04±0,11 см³/г) және орташа кеуек өлшемін (33±9 нм) көрсетті, бұл жоғары дисперсия мен дамыған кеуек жүйесін көрсетеді. Қуаттың 1,0 кВт-қа дейін жоғарылауымен (C-2 үлгісі) меншікті беттің 60±2 м²/г дейін күрт төмендеуі және кеуек көлемінің төмендеуі байқалды, бұл бөлшектердің үлкеюіне және құрылымның тығыздалуына байланысты болуы мүмкін. Шағылысқан қуаты 0,6 кВт (нақты қуаты 0,8 кВт) болатын 1,4 кВт қуатта алынған C-3 үлгісі C-1 мен C-2 арасындағы меншікті бет (111±2 м²/г) және кеуек көлемі (0,86±0,14 см³/г) арасындағы аралық жағдайға ие болады, бұл көміртек морфология-

сының АЖЖ разрядының қуатынан тәуелділігін растайды. Аталған нәтижелер қуаттың жоғарылауы меншікті беттің төмендеуіне және кеуекті құрылымның өзгеруіне әкелетінін көрсетеді, бұл берілген сипаттамалары бар материалдарды алу үшін шың параметрлерінің тәуелділігін растайды.

ҚОРЫТЫНДЫ

Осы зерттеуде атмосфералық қысым және газ қоспасының белгіленген шығысы кезінде микротолқынды разрядтағы метан пиролизі жағдайында алынған көміртекті материалдарды қалыптастыру ерекшеліктері талданды. АЖЖ-плазма қуатының үлгілердің морфологиялық және текстуралық сипаттамаларына әсеріне ерекше көңіл бөлінеді.

Магнетрон қуатының артуы алынған көміртектің физикалық-химиялық қасиеттеріне кешенді әсер ететіні анықталды. Қуаты 0,6 кВт төмен температуралық пиролиз нәтижесінде кеуекті құрылымы дамыған ірі агломераттар қалыптасады. Қуатты 1,0 кВт дейін арттыру неғұрлым ұсақ, біркелкі бөлінген бөлшектердің пайда болуына әкеледі. Алайда, қуаттың 1,4 кВт-қа дейін одан әрі ұлғаюы кезінде көрсетілген қуаттың есебінен энергияның елеулі ысырабы байқалады, бұл текстуралық сипаттамалардың нашарлауымен, меншікті беттің төмендеуімен және кеуек құрылымының өзгеруімен қатар жүреді.

XRD-талдау деректері зерттелетін көміртекті материалдардың кристалдылығы төмен турбостраттық құрылымнан жоғары реттелген графитке ауысуын көрсетеді. Осылайша, температураның көтерілуі көміртектің ішінара графиттелуіне, кристалдылық дәрежесінің ұлғаюына және графен тәрізді құрылымдардың қалыптасуына ықпал етеді.

ВЕТ және ВЖН талдауларының нәтижелері барлық үлгілердің мезокеуекті құрылымға ие екенін растайды. Алайда, меншікті беткі ауданы мен кеуек көлемі процесс қуатына тәуелді екені анықталды. Кеуектердің меншікті беті мен көлемінің ең жоғары мәндері 0,6 кВт синтезделген үлгі үшін тіркелді. Қуаттың 1,0 және 1,4 кВт-қа дейін ұлғаюымен бұл параметрлердің жүйелі төмендеуі байқалады, бұл көміртекті наноқұрылымдардың қалыптасуы механизмдерінің өзгеруіне және бөлшектердің іріленуімен түсіндіріледі.

Осылайша, микротолқынды разрядтың қуаты көміртекті материалдардың морфологиясын, кристалдылық дәрежесін және кеуектілігін бақылайтын анықтаушы технологиялық параметр болып табылады. Зерттеу барысында аса жоғарғы жиілікті плазма қуаты көміртегі материалдарының құрылымдық және функционалдық параметрлерін мақсатты түрде реттеуге қабілеттілігі дәлелденді. Плазмалық синтез шарттарын оңтайландыру катализде, адсорбцияда, энергия жинақтауыштарда және басқа да жоғары технологиялық салаларда қолдану үшін берілген қасиеттері бар көміртекті мақсатты алу перспективаларын ашады.

Жұмыс Қазақстан Республикасы Ғылым және жоғары білім министрлігінің бағдарламалық-нәсәналы қаржыландыруы шеңберінде орындалды (№ BR21882200 «Сутегін алу, сақтау және электр энергиясын генерациялауға арналған инновациялық технологияларды, материалдар мен құрылғыларды әзірлеу және зерттеу»).

ӘДЕБИЕТТЕР / REFERENCES

1. IEA. Global Hydrogen Review 2024 / IEA. – Paris: IEA, 2024. – Режим доступа: <https://www.iea.org/reports/global-hydrogen-review-2024>. – Загл. с экрана. – Licence: CC BY 4.0.
2. Стратегия достижения углеродной нейтральности Республики Казахстан до 2060 года. – Режим доступа: <https://adilet.zan.kz/rus/docs/U2300000121>. – Загл. с экрана.
3. IEA. Hydrogen / IEA. – Paris: IEA, 2023. – Режим доступа: <https://www.iea.org/reports/hydrogen-2156>. – Загл. с экрана. – Licence: CC BY 4.0.
4. Fincke, J. R., Anderson, R. P., Hyde, T. et al. Plasma thermal conversion of methane to acetylene // Plasma Chemistry and Plasma Processing. – 2002. – Vol. 22, No. 1. – P. 107–138. <https://doi.org/10.1023/A:1012944615974>
5. Sánchez-Bastardo, N., Schlögl, R., Ruland, H. Methane pyrolysis for zero-emission hydrogen production: a potential bridge // Industrial & Engineering Chemistry Research. – 2021. – Vol. 60, No. 32. – P. 11855–11881. – <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.1c01679>
6. Technology from fossil fuels to a renewable and sustainable hydrogen economy // Industrial & Engineering Chemistry Research. – 2021. – Vol. 60, No. 48. – P. 17795–17796. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.1c04435>
7. Cheon, S., Byun, M., Lim, D., Lee, H., Lim, H. Parametric study for thermal and catalytic methane pyrolysis for hydrogen production: techno-economic and scenario analysis // Energies. – 2021. – Vol. 14, No. 19. – Article 6102. <https://doi.org/10.3390/en14196102>
8. Dagle, R., Dagle, V., Bearden, M., Holladay, J., Krause, T., Ahmed, S. R&D opportunities for development of natural gas conversion technologies for co-production of hydrogen and value-added solid carbon products: technical report PNNL-26726 / Pacific Northwest National Laboratory. – Richland, WA, 2017. – Режим доступа: https://www.pnnl.gov/main/publications/external/technical_reports/pnnl-26726.pdf. – Загл. с экрана.
9. Kim, M. H., Lee, E. K., Jun, J. H., Kong, S. J., Han, G. Y., Lee, B. K., Lee, T., Yoon, K. J. Hydrogen production by catalytic decomposition of methane over activated carbons: kinetic study // International Journal of Hydrogen Energy. – 2004. – Vol. 29, No. 2. – P. 187–193. [https://doi.org/10.1016/S0360-3199\(03\)00111-3](https://doi.org/10.1016/S0360-3199(03)00111-3)
10. Muradov, N. Hydrogen via methane decomposition: an application for decarbonization of fossil fuels // International Journal of Hydrogen Energy. – 2001. – Vol. 26, No. 11. – P. 1165–1175. [https://doi.org/10.1016/S0360-3199\(01\)00073-8](https://doi.org/10.1016/S0360-3199(01)00073-8)
11. Lee, E. K., Lee, S. Y., Han, G. Y., Lee, B. K., Lee, T., Jun, J. H., Yoon, K. J. Catalytic decomposition of methane over carbon blacks for CO₂-free hydrogen production // Carbon. – 2004. – Vol. 42, No. 13. – P. 2641–2648. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2004.06.003>

12. Prabowo, J., Lai, L., Chivers, B., Burke, D., Dinh, A. H., Ye, L., Wang, Y., Wei, L., Chen, Y. Solid carbon co-products from hydrogen production by methane pyrolysis: current understandings and recent progress // Carbon. – 2024. – Vol. 216. – Article 118507. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2023.118507>
13. Skakov, M., Miniyafov, A., Tulenbergenov, T., Sokolov, I., Zhanbolatova, G., Kaiyrbekova, A., Agatanova, A. Hydrogen production by methane pyrolysis in the microwave discharge plasma // AIMS Energy. – 2024. – Vol. 12, No. 3. – P. 548–560. <https://doi.org/10.3934/energy.2024026>
14. Skakov, M. K., Tulenbergenov, T. R., Sokolov, I. A., Miniyafov, A. Zh., Agatanova, A. A. Experimental study of methane conversion in a microwave discharge // NNC RK Bulletin. – 2024. – No. 3. – P. 123–128. – (In Russ.). <https://doi.org/10.52676/1729-7885-2024-3-123-128>
15. International Organization for Standardization. ISO 9277:2022. Determination of the specific surface area of solids by gas adsorption – BET method: 3rd ed. – Geneva : ISO, 2022.
16. International Organization for Standardization. ISO 15901-1:2016. Evaluation of pore size distribution and porosity of solid materials by mercury porosimetry and gas adsorption – Part 1: mercury porosimetry: 2nd ed. – Geneva : ISO, 2016.
17. Dresselhaus, M. S., Dresselhaus, G. Intercalation compounds of graphite // Advances in Physics. – 2002. – Vol. 51, No. 1. – P. 1–186. <https://doi.org/10.1080/00018730110113644>
18. Dahn, J. R. Structure and electrochemistry of carbon electrodes for rechargeable lithium batteries // Science. – 1995. – Vol. 270, No. 5236. – P. 590–593.
19. Ferrari, A. C., Robertson, J. Interpretation of Raman spectra of disordered and amorphous carbon // Physical Review B. – 2000. – Vol. 61, No. 20. – P. 14095–14107. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.61.14095>
20. Franklin, R. E. The structure of graphitic carbon // Acta Crystallographica. – 1951. – Vol. 4, No. 3. – P. 253–261. <https://doi.org/10.1107/S0365110X51000842>
21. Thommes, M., Kaneko, K., Neimark, A. V., Olivier, J. P., Rodriguez-Reinoso, F., Rouquerol, J., Sing, K. S. W. Physisorption of gases, with special reference to the evaluation of surface area and pore size distribution (IUPAC Technical Report) // Pure and Applied Chemistry. – 2015. – Vol. 87, No. 9–10. <https://doi.org/10.1515/pac-2014-1117>

ПЛАЗМОХИМИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ УГЛЕРОДА ИЗ МЕТАНА В МИКРОВОЛНОВОМ РАЗРЯДЕ

**М. К. Скаков¹, А. Ж. Миниязов², И. А. Соколов^{2,3}, Т. Р. Туленберген^{2,3},
А. А. Агатамова^{2,3*}, А. А. Сабыртаева², Б. Е. Бекмагамбетова²**

¹ РГП «Национальный ядерный центр Республики Казахстан», Курчатов, Казахстан

² Филиал «Институт атомной энергии» РГП НЯЦ РК, Курчатов, Казахстан

³ НАО «Университет Шакарима», Семей, Казахстан

* E-mail для контактов: agatanova@nnc.kz

В данной работе представлены результаты комплексного исследования углеродных материалов, синтезированных методом пиролиза метана в микроволновом разряде при атмосферном давлении. Основное внимание уделено влиянию мощности СВЧ-разряда на морфологические, фазовые и текстурные характеристики получаемого углерода. С помощью сканирующей электронной микроскопии (SEM) установлено, что увеличение мощности от 0,6 до 1,4 кВт приводит к уменьшению среднего размера частиц с ~20,2 до ~10,4 мкм и к формированию более дисперсной структуры. Рентгеноструктурный анализ (XRD) продемонстрировал переход углерода от аморфной турбостратной структуры к более упорядоченной графитоподобной фазе с увеличением температуры процесса. Методами низкотемпературной адсорбции азота (БЕТ и ВДН) показано, что углеродные материалы характеризуются мезопористой структурой, а максимальные значения удельной поверхности и объема пор (628 м²/г и 5,04 см³/г, соответственно) наблюдаются при минимальной мощности магнетрона. Полученные результаты указывают на ключевую роль мощности СВЧ-плазмы в управлении структурой и функциональными характеристиками углеродных материалов, что открывает перспективы их использования в катализе, сорбции и накоплении энергии.

Ключевые слова: пиролиз метана, микроволновая плазма, углеродные материалы, структурные свойства, БЭТ, ХРД, СЭМ.

PLASMA-CHEMICAL SYNTHESIS OF CARBON FROM METHANE
IN A MICROWAVE DISCHARGE

M. K. Skakov¹, A. Zh. Miniyazov², I. A. Sokolov^{2,3}, T. R. Tulenbergenov^{2,3},
A. A. Agatanova^{2,3*}, A. A. Sabyrtaeva², B. E. Bekmagambetova²

¹ RSE “National Nuclear Center of the Republic of Kazakhstan”, Kurchatov, Kazakhstan

² Branch “Institute of Atomic Energy” RSE NNC RK, Kurchatov, Kazakhstan

³ Shakarim University, Semey, Kazakhstan

* E-mail for contacts: agatanova@nnc.kz

This study presents a comprehensive investigation of carbon materials synthesized via methane pyrolysis in a microwave plasma discharge under atmospheric pressure. Particular attention is paid to the influence of microwave power on the morphological, phase, and textural characteristics of the resulting carbon. Scanning electron microscopy (SEM) revealed that increasing the discharge power from 0.6 to 1.4 kW leads to a reduction in average particle size (from ~20.2 to ~10.4 μm) and the formation of more dispersed structures. X-ray diffraction (XRD) analysis showed a transition from a turbostratic, amorphous phase to a more ordered, graphite-like structure with increasing process temperature. Nitrogen adsorption analysis using the BET and BJH methods confirmed the mesoporous nature of the materials, with the highest specific surface area and pore volume observed at the lowest plasma power (628 m^2/g and 5.04 cm^3/g , respectively). These findings demonstrate that microwave discharge power is a key parameter for tailoring the structure and functionality of carbon materials, making them promising candidates for applications in catalysis, adsorption, and energy storage.

Keywords: methane pyrolysis, microwave plasma, carbon materials, structural properties, BET, XRD, SEM.

<https://doi.org/10.52676/1729-7885-2025-4-159-167>

УДК 621.039.53

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ РАДИАЦИОННОГО РАЗОГРЕВА МАТЕРИАЛОВ ПРИ ИХ ОБЛУЧЕНИИ В РЕАКТОРЕ ИГР

Н. Е. Мухамедов¹, Г. А. Витюк¹, Р. А. Иркимбеков¹,
С. А. Должиков^{1*}, А. С. Сураев¹, Р. Е. Келсингазина^{1,2}

¹ РГП «Национальный ядерный центр Республики Казахстан», Курчатов, Казахстан

² Shakarim University, Семей, Казахстан

* E-mail для контактов: dolzhikov@nnc.kz

В статье представлены результаты экспериментов по измерению температуры образцов конструкционных материалов, подвергнутых радиационному разогреву в условиях импульсного облучения на исследовательском реакторе ИГР. Для регистрации температуры разработано внутриреакторное экспериментальное устройство, состоящее из защитной ампулы с максимально разреженной средой, внутри которой размещались исследуемые образцы. Термопары интегрированы непосредственно в структуру образцов, с целью измерения температуры внутри материала. Исследованы температурные отклики 12 материалов, включая тугоплавкие металлы, высоколегированные стали и алюминиевые сплавы. Установлены характерные закономерности нагрева, отражающие влияние физических и радиационных свойств материалов. Полученные данные актуальны для верификации теплотехнических моделей и повышения точности расчетов при проектировании оборудования для ядерных установок.

Ключевые слова: ИГР, радиационный разогрев, конструкционные материалы, энерговыделение.

ВВЕДЕНИЕ

При проведении испытаний в исследовательских ядерных реакторах особое значение приобретает знание температурного состояния экспериментальных устройств и средств измерений, размещаемых в активной зоне. Под действием нейтронного и гамма-излучения конструкционные элементы таких устройств могут существенно разогреваться, что оказывает влияние как на достоверность измерений, так и на интерпретацию результатов эксперимента. Для расчетного обоснования термических режимов при проектировании таких установок необходимо надежно оценивать величину радиационного энерговыделения и температурный отклик применяемых материалов.

Понимание процессов радиационного разогрева и накопление экспериментальных данных в этой области являются важным направлением ядерных исследований. В мировой практике накоплен определенный опыт по экспериментальному определению температуры при облучении материалов различного назначения. Такие исследования активно проводились на исследовательских реакторах, включая ATR (США) [1], BR2 (Бельгия) [2], HFETR (Китай) [3], BOR-60 (Россия) [4], OSIRIS (Франция) [5], HANARO (Корея) [6] и других установках, где изучались тепловые эффекты в нержавеющей стали, алюминиевых, циркониевых сплавах, графите и др. Измерения проводились как с использованием встроенных термопар и пирометров, так и методами постоблучательного анализа [7–9].

Однако большинство таких экспериментов проводилось в условиях, существенно отличающихся от режимов исследовательского реактора ИГР [10] – как по спектру и плотности нейтронного потока, так и по характеру энерговыделения (транзистентные или им-

пульсные режимы). Более того, каждый исследовательский реактор имеет свою специфику: энерговыделение, флюенс, спектр и тип нейтронов, тепловые условия, геометрию активной зоны, а также различную конструкцию экспериментальных устройств, размещаемых в ней. Существенное влияние оказывает и тип измерительных средств, применяемых в зонах облучения – будь то термопары, корпусные элементы датчиков или спай чувствительных элементов – поскольку каждый такой элемент имеет свой теплофизический и радиационно-физический отклик.

В связи с этим на реакторе ИГР в начале 2000-х годов были проведены первые эксперименты по изучению радиационного нагрева конструкционных материалов [11]. Эти исследования положили основу для накопления экспериментальных данных, необходимых для последующего анализа тепловых процессов в условиях облучения конструкционных элементов, помещаемых в активную зону реактора. В проведенных экспериментах температура измерялась с использованием термопар, закрепленных на поверхности образцов методом «кернация», а облучение проводилось в газовой среде. Были получены температурные отклики радиационного разогрева для ряда образцов.

С тех пор существенно возросли требования не только к точности интерпретации, но и к прогнозированию процессов, протекающих в облучательных устройствах на реакторе ИГР. Это связано с развитием вычислительных методов моделирования, которые применяются специалистами НЯЦ РК при проектировании и анализе реакторных устройств [12–15]. Современные подходы основаны на комплексном учете тепловых и нейтронно-физических характеристик облучаемых объектов, что требует наличия дос-

товерной и воспроизводимой экспериментальной базы. В этих условиях возникла необходимость в проведении уточняющих измерений, обеспечивающих более высокий уровень соответствия между расчетными и реальными параметрами облучения.

В рамках новых экспериментальных исследований, выполненных на реакторе ИГР, расширен перечень исследуемых материалов, проведено облучение в условиях высоко разряженной среды, горячий спай термопары размещен непосредственно внутри образца, что обеспечило более точное определение температурного отклика материала.

В результате получена экспериментальная зависимость температуры материалов от энерговыделения в реакторе, зафиксированы характерные температурные уровни для различных типов конструкционных сплавов, а также выполнен анализ влияния тепловых и радиационных свойств на интенсивность нагрева.

КОНСТРУКЦИЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОГО УСТРОЙСТВА

Экспериментальное устройство для измерения температуры радиационного разогрева конструкционных материалов разработано с учетом особенностей исследовательского реактора ИГР. Конструкция экспериментального устройства предусматривает его размещение в центральном экспериментальном канале активной зоны и позволяет проводить температурные измерения непосредственно в условиях воздействия нейтронного и гамма-излучения.

Основным элементом экспериментального устройства является герметичная ампула из циркониевого сплава с крышкой (рисунок 1). Ампула обеспечивает защиту и механическую фиксацию внутренней испытательной секции, а также герметичное подключение измерительных средств.

Внутри ампулы размещена испытательная секция, представляющая собой дисковую конструкцию, закрепленную на центральном стержне (рисунки 1, 2). Такое исполнение обеспечивает симметричное расположение образцов относительно центра активной зоны и позволяет точно позиционировать их в зоне максимального нейтронного потока. Каждый образец устанавливается в отверстие алюминиевого диск-держателя без использования ложементов. Первоначально предполагалось применение кварцевых вставок-ложементов (рисунок 1), однако после проведения расчетного анализа от них отказались, поскольку материал ложементов мог сам подвергаться радиационному нагреву и влиять на точность регистрации температурного отклика исследуемого образца. Всего в одном экспериментальном цикле может размещаться до 12 образцов – по шесть на каждом из двух алюминиевых дисков. Для обеспечения термической изолированности и однородности условий облучения между дисками поддерживается фиксированное расстояние 100 мм, при этом они располагаются симметрично относительно центра активной зоны

реактора. Положение испытательной секции может регулироваться штангой по высоте относительно центра активной зоны реактора ИГР в пределах ± 50 мм. Высотное положение подбирается таким образом, чтобы обеспечить равное облучение образцов, расположенных на верхнем и нижнем диске.

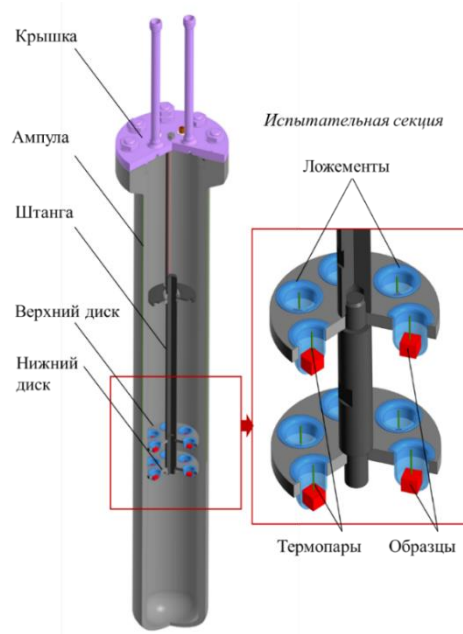
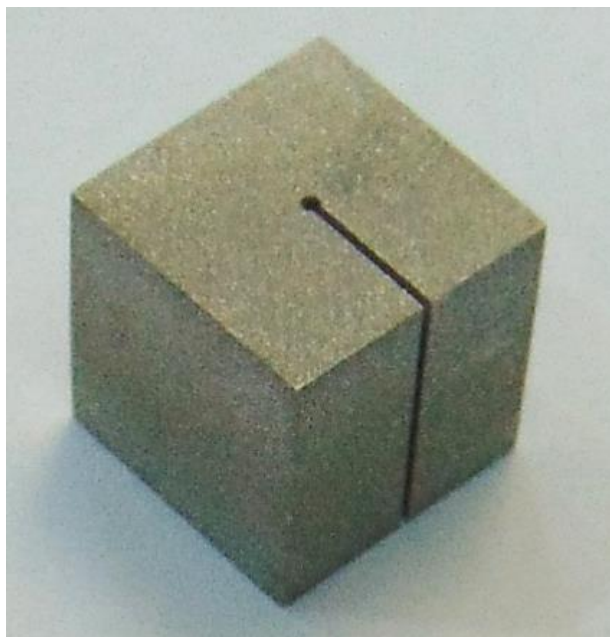


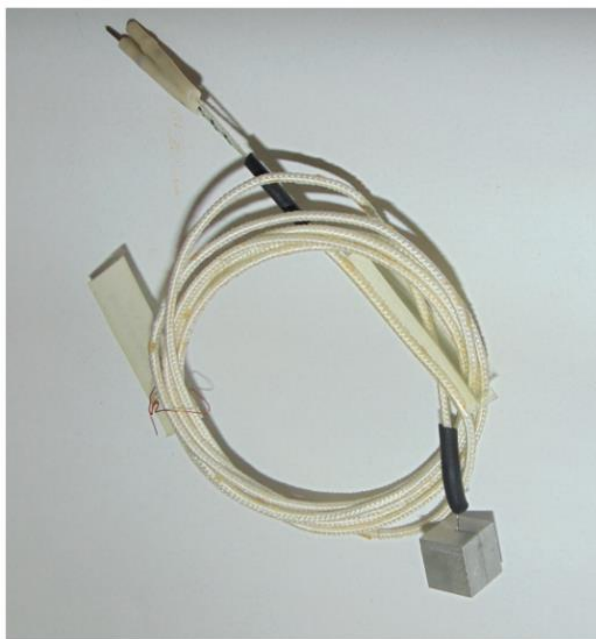
Рисунок 1. Эскиз экспериментального устройства



Рисунок 2. Внешний вид испытательной секции экспериментального устройства



а) типичный вид образца



б) термометрированный образец

Рисунок 3. Способ термометрирования образцов

В перечень исследуемых материалов вошли представители большинства основных групп конструкционных металлов, сплавов и тугоплавких соединений, потенциально используемых при изготовлении элементов экспериментальных устройств, измерительных модулей и термопар, применяемых в ядерных установках. Всего было исследовано 12 материалов, включая технически чистые металлы (медь, тантал, титан, никель и др.), алюминиевые (АМг-6 и АД) и

жаропрочные и высоколегированные стали (12Х18Н10Т, 12Х1МФ, 12ХН35В). Образцы изготовлены в форме кубов со стороной 10 мм (рисунок 3а). Выбор одинакового характерного размера позволил обеспечить сопоставимые условия облучения и теплопереноса для различных материалов, а также минимизировать температурные градиенты внутри образца. В каждый образец оборудован термопарой типа ХА с открытым спаем, расположенным в центральной части, что позволило регистрировать температурный отклик непосредственно внутри материала (рисунок 3б). Термопара типа ХА имеет преимущество за счет минимального поглощения гамма-излучения и нейтронов. Таким образом термопара вносит минимальное возмущение. Дополнительно в экспериментальную секцию установлена одна свободно подвешенная термопара, не связанная с каким-либо образцом. Ее показания необходимы для регистрации температуры, обусловленной собственным радиационным нагревом термопары в условиях отсутствия теплопередачи от твердого тела.

Использование максимально разряженной среды внутри ампулы, встроенных термопар (с размещением спаев внутри образцов), а также возможность точного позиционирования обеспечивают стабильное и воспроизводимое измерение температурных параметров в процессе облучения.

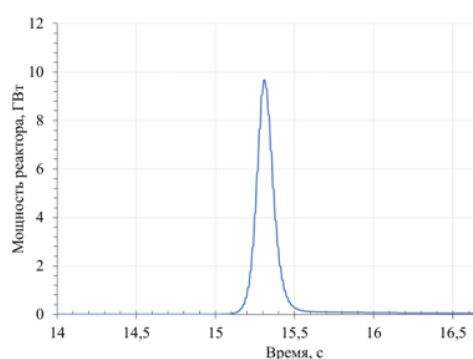
УСЛОВИЯ ОБЛУЧЕНИЯ

В рамках проведенных исследований выполнены два внутриреакторных эксперимента с разным набором исследуемых образцов (рисунок 4б, г). Каждый эксперимент включал установку экспериментального устройства в центральный экспериментальный канал (ЦЭК) реактора ИГР. После подключения всех необходимых инженерных и измерительных систем осуществлялась герметизация ампулы и создание разряженной среды внутри, что исключало влияние газового теплообмена на температурный отклик образцов.

Облучение проводилось в режиме самогасящейся вспышки с резким кратковременным нарастанием мощности (рисунок 4а, в). После завершения вспышки и останова реактора осуществлялось расхолаживание как самого реактора, так и экспериментального устройства. Регистрация температуры выполнена в период от начала пуска до полного охлаждения системы.

Для первого пуска отобраны образцы с минимальным потенциалом к радиационному разогреву. Это позволило выполнить исследования на максимально возможном уровне мощности реактора. Во втором пуске облучены образцы, которые имеют высокий потенциал к радиационному разогреву. Для гарантированного сохранения целостности установки и образцов во втором пуске реализована диаграмма с меньшим выделением энергии.

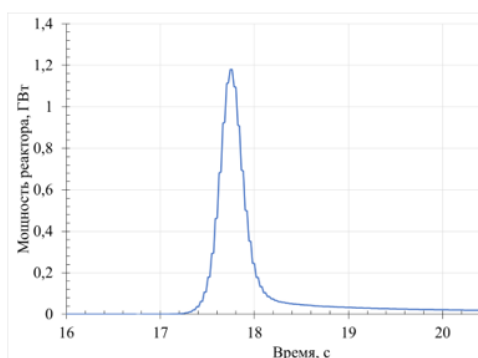
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ РАДИАЦИОННОГО РАЗОГРЕВА МАТЕРИАЛОВ ПРИ ИХ ОБЛУЧЕНИИ В РЕАКТОРЕ ИГР



а) диаграмма изменения мощности реактора (эксперимент 1, энерговыделение в реакторе 1,34 ГДж)

Верхний диск	Алюминий АМг-6	ТЭП-1	Номер термопары в образце
	Алюминий АД	ТЭП-2	
	Свободная термопара	ТЭП-3	
	Сталь 12Х18Н10Т	ТЭП-4	
	Сталь 12Х1МФ	ТЭП-5	
	Титан ВТ1-0	ТЭП-6	
Нижний диск	Сталь 12Х1МФ	ТЭП-7	
	Свободная термопара	ТЭП-8	
	Титан ВТ1-0	ТЭП-9	
	Сталь 12Х18Н10Т	ТЭП-10	
	Алюминий АМг-6	ТЭП-11	
	Сталь ХН35ВТ	ТЭП-12	

б) набор испытываемых образцов (эксперимент 1)



в) диаграмма изменения мощности реактора (эксперимент 2, энерговыделение в реакторе 0,44 ГДж)

Верхний диск	Никель НП2	ТЭП-1	Номер термопары в образце
	Медь М1	ТЭП-2	
	Тантал ТВЧ	ТЭП-3	
	Свободная термопара	ТЭП-4	
	Молибден МЧ	ТЭП-5	
	Свинец СЗ	ТЭП-6	
Нижний диск	Никель НП2	ТЭП-7	
	Вольфрам ВА	ТЭП-8	
	Тантал ТВЧ	ТЭП-9	
	Медь М1	ТЭП-10	
	Вольфрам ВА	ТЭП-11	
	Свободная термопара	ТЭП-12	

г) набор испытываемых образцов (эксперимент 2)

Рисунок 4. Диаграммы изменения мощности реактора ИГР и экспериментальные наборы материалов

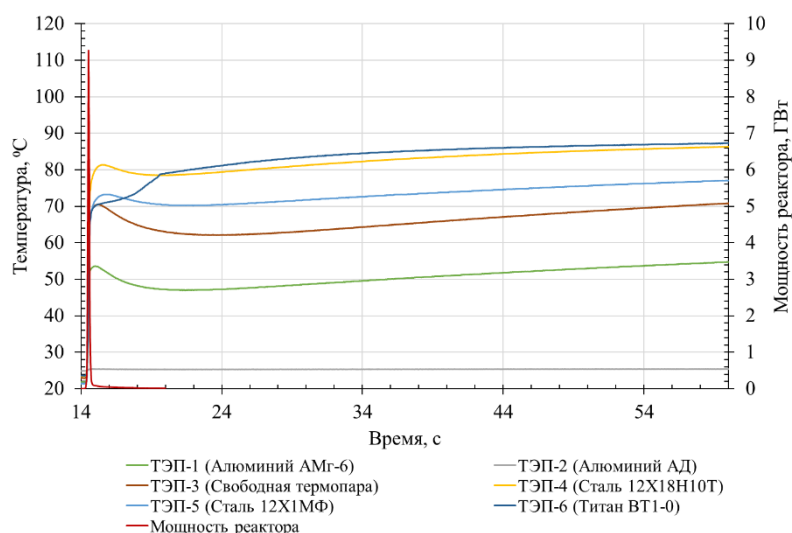


Рисунок 5. Изменение температуры термопар, установленных в образцах (верхний диск, первый эксперимент)

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Температурные отклики образцов, полученные в первом эксперименте, представлены на рисунках 5 и 6. Рисунок 5 соответствует термопарам, установлен-

ным в образцах на верхнем диске, рисунок 6 – на нижнем. На оба графика также нанесена диаграмма изменения мощности реактора в режиме самогасящейся вспышки.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ РАДИАЦИОННОГО РАЗОГРЕВА МАТЕРИАЛОВ ПРИ ИХ ОБЛУЧЕНИИ В РЕАКТОРЕ ИГР

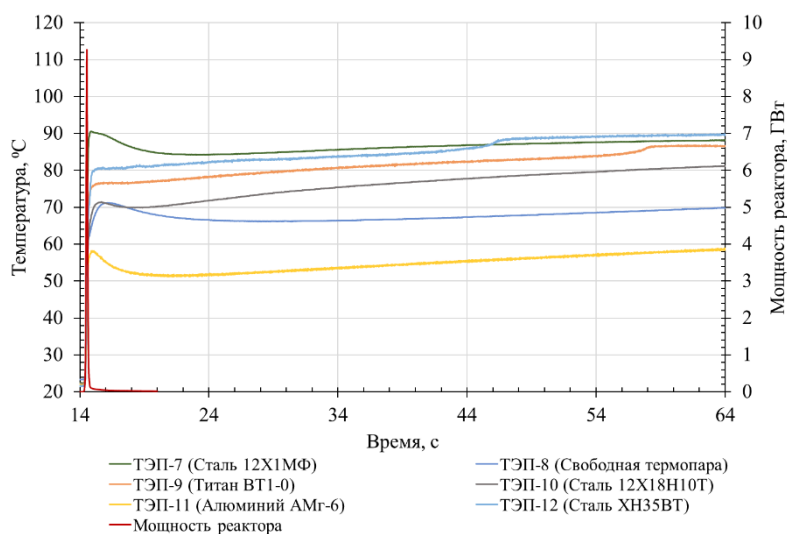


Рисунок 6. Изменение температуры термопар, установленных в образцах (нижний диск, первый эксперимент)

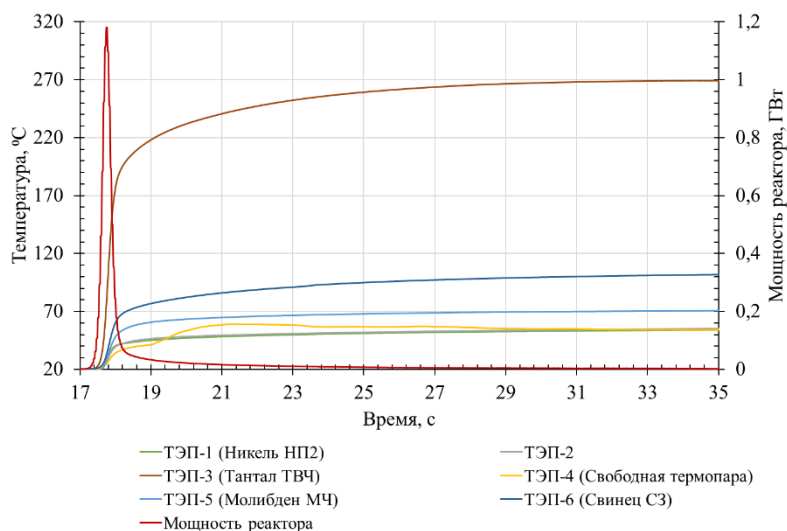


Рисунок 7. Изменение температуры термопар, установленных в образцах (верхний диск, второй эксперимент)

Различия в динамике нагрева отражают теплофизические свойства материалов: более высокие температуры достигнуты у образцов из сталей и титана ВТ1-0. Алюминиевый сплав АМг-6 показал минимальные значения температуры.

Для анализа условий без теплопроводного контакта использовалась свободная термопара (ТЭП-3 на верхнем диске, ТЭП-8 на нижнем), регистрировавшая собственный радиационный нагрев в вакууме.

Результаты второго эксперимента представлены на рисунках 7 и 8. Они соответствуют температурным откликам образцов, размещенных на верхнем и нижнем дисках соответственно. На графиках также показана диаграмма мощности реактора, отражающая характер облучения в режиме самогасящейся вспышки.

Зарегистрированные температурные кривые демонстрируют выраженные различия между исследуемыми материалами. Наиболее интенсивный нагрев отмечен для тантала (ТЭП-3, ТЭП-9) и вольфрама (ТЭП-8, ТЭП-11). Наименьшие значения температуры зафиксированы у образцов из меди (ТЭП-10), никеля (ТЭП-1, ТЭП-7) и свинца (ТЭП-6). Незначительные расхождения между термопарами, установленными в образцы из одного и того же материала (например, вольфрам), могут быть обусловлены особенностями теплового контакта или расположением спая.

Свободно размещенные термопары (ТЭП-4 и ТЭП-12) позволили зафиксировать температурную реакцию чувствительных элементов, облучаемых без контакта с твердым телом.

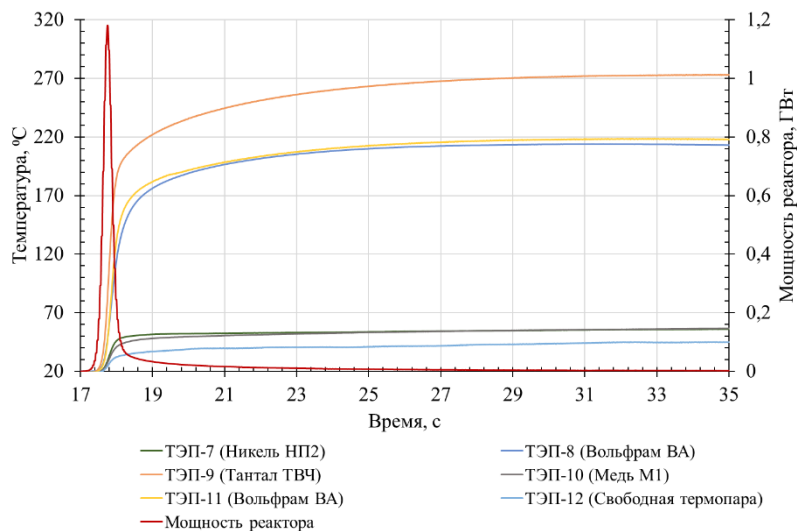


Рисунок 8. Изменение температуры термопар, установленных в образцах (нижний диск, второй эксперимент)

Свободно размещенные термопары (ТЭП-4 и ТЭП-12) позволили зафиксировать температурную реакцию чувствительных элементов, облучаемых без контакта с твердым телом.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Во всех экспериментах наблюдается задержка достижения температурного максимума относительно пика мощности реактора. Инерционность температурного отклика образцов обусловлена их теплоемкостью и низкой эффективностью теплоотвода в разряженной среде, что приводит к накоплению энергии даже после окончания импульса.

Температурные кривые в пределах одного уровня (верхнего или нижнего диска) демонстрируют близкую форму и синхронность, что подтверждает однородность условий облучения. Незначительные расхождения между термопарами, установленными в образцы из одного и того же материала (например, ТЭП-8 и ТЭП-11 – вольфрам, ТЭП-1 и ТЭП-7 – никель) могут быть обусловлены различиями в глубине установки термоспая, микроскопическими зазорами в точке контакта или незначительным смещением относительно максимума плотности потока. При этом форма кривых остается схожей, что подтверждает повторяемость условий и стабильность методики.

Температурные отклики, зафиксированные в ходе двух проведенных экспериментов, демонстрируют различия в амплитуде и в характере изменения температуры во времени. Это связано с особенностями режимов облучения и составом исследуемых материалов.

Так, например, во втором эксперименте, при пиковой мощности реактора порядка 1,2 ГВт, максимальные температуры в образцах достигли 240–270 °C (тантал, вольфрам). Температурные кривые отличались устойчивым подъемом с характерной двухфазной структурой: вначале наблюдался резкий температурный скачок, за которым следовал более

плавный прирост температуры, приводящий к выходу на плато. Такой профиль обусловлен суперпозицией нескольких физических процессов. На начальном этапе основную роль играет поглощение γ -излучения, вызывающее быстрый локальный нагрев. Далее, по мере развития вспышки, в температурный отклик вносит вклад остаточное γ -излучение от продуктов деления и активации, γ -излучение от активации образца, а также внутреннее перераспределение тепла в образце. Вторая фаза характеризуется постепенным «догревом» материала вплоть до завершения облучения. Подобное поведение объясняется как длительностью вспышки (~1 с), так и тепловой инерцией тел.

В первом эксперименте, несмотря на существенно более высокую мощность вспышки (около 9,7 ГВт), температурный отклик всех образцов находился в диапазоне 60–90 °C. Температурный отклик образцов характеризуется тремя фазами. В первой фазе наблюдается резкий рост температуры, вызванный интенсивным поглощением энергии γ - и нейтронного излучения при вспышке реактора. Вторая фаза – кратковременное снижение температуры – связана с перераспределением энергии от горячих зон к холодным участкам внутри образца за счёт теплопроводности. В третьей фазе начинается медленное продолжение разогрева, обусловленное внутренним тепловым выравниванием и отсутствием внешнего охлаждения в условиях разряженной среды.

Анализ температурных откликов свободных термопар показал, что зарегистрированные значения были существенно ниже по сравнению с термопарами, встроенными в объём образцов, где спай находился непосредственно внутри материала. Это подтверждает, что основной вклад в температурный подъём вносит не прямое воздействие γ - и нейтронного излучения на спай термопары, а радиационный нагрев самого материала образца, который затем передаёт тепло

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ РАДИАЦИОННОГО РАЗОГРЕВА МАТЕРИАЛОВ ПРИ ИХ ОБЛУЧЕНИИ В РЕАКТОРЕ ИГР

к спаю за счёт теплопроводности. Таким образом, свободная термопара играла роль контрольного измерителя, позволяющего отделить температурный отклик материала от возможного радиационного нагрева самой измерительной системы.

Для анализа температурного отклика различных материалов при радиационном облучении в таблице 1 приведены основные физико-химические характеристики исследуемых образцов: атомный номер A , плотность ρ , удельная теплоемкость C_p и сечение поглощения тепловых нейтронов σ . Эти параметры определяют способность материала к поглощению энергии γ - и нейтронного излучения и её последующему преобразованию в тепловую энергию. Представленные данные позволяют объяснить наблюдаемые различия в характере температурных кривых и ранжировать материалы по эффективности радиационного нагрева.

Представленные в таблице характеристики позволяют установить взаимосвязь между радиационным температурным откликом материалов и их физико-химическими свойствами. Полученные данные позволили классифицировать материалы по уровню радиационного нагрева и использовать это для последующего выбора конструкционных и измерительных

элементов, предназначенных для работы в активной зоне реактора. Таким образом, таблица обосновывает наблюдаемые температурные эффекты и служит основой для прогнозирования радиационного поведения материалов в условиях облучения на реакторе ИГР.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате проведённых на реакторе ИГР экспериментов установлено, что интенсивность радиационного разогрева конструкционных материалов напрямую зависит от их физических и радиационных свойств (таких как атомный номер, плотность, теплоёмкость, сечение поглощения нейтронов). Зафиксированы характерные температурные отклики для различных групп сплавов: тяжёлые высокоплотные материалы с большим атомным номером демонстрируют значительно более сильный радиационный нагрев (преимущественно за счёт γ -излучения), тогда как лёгкие металлы и сплавы с низкой плотностью и высокой теплоёмкостью нагреваются существенно меньше. На основе экспериментальных данных проведена классификация материалов по степени радиационного нагрева.

Таблица 1. Физико-химические свойства исследуемых материалов и их температурный отклик при облучении в реакторе ИГР [16–20]

Материал	A	ρ , г/см ³	C_p , Дж/(г·К)	σ (барн)	Температурный отклик
Тантал	73	16,60	140	20,6	Высокий. Большой атомный номер, высокая плотность, значительное сечение поглощения γ - и нейтронного излучения, низкая теплоемкость – эффективный радиационный нагрев.
Вольфрам	74	19,30	134	18,3	Высокий. Большой атомный номер, высокая плотность, значительное сечение поглощения γ - и нейтронного излучения, низкая теплоемкость – эффективный радиационный нагрев.
Титан	22	4,50	520	6,1	Средний. Относительно низкий атомный номер и плотность, малое сечение поглощения излучения, высокая теплоемкость – ограниченный радиационный нагрев.
Никель	28	8,90	440	4,5	Средний. Средний атомный номер и плотность, невысокое сечение поглощения, умеренная теплоемкость – умеренный радиационный нагрев.
Медь	29	8,96	385	3,8	Средний. Средний атомный номер и плотность, невысокое сечение поглощения, умеренная теплоемкость – умеренный радиационный нагрев.
Молибден	42	10,20	251	2,7	Средний. Средний атомный номер и плотность, низкое сечение поглощения, умеренная теплоемкость – приводит к выраженному, но не максимальному нагреву.
12X18H10T	26 (Fe)	7,90–8,00	~500	~2,5–3,0 (вклад Fe, Cr, Ni)	Средний. Умеренное сечение, высокая теплоемкость, высокая плотность благодаря содержанию никеля и хрома – обеспечивается стабильный, но не максимальный нагрев.
12X1МФ	26 (Fe)	7,70–7,80	~460	~2,0–2,5 (вклад Fe)	Средний. Средняя плотность, умеренное сечение поглощения, теплоемкость выше средней – нагрев выражен умеренно.
12ХН35В	26 (Fe)	8,00–8,20	~470	~2,5–3,5 (вклад Fe, Cr, Ni)	Средний. Повышенная плотность и атомный номер за счёт никеля и хрома, среднее сечение, высокая теплоемкость – даёт стабильный, средний температурный отклик.
АМг-6	13 (Al)	2,65–2,70	~880	~0,23 (вклад Al)	Низкий. Низкий атомный номер, малая плотность, крайне низкое сечение поглощения – несмотря на высокую теплоемкость, радиационный нагрев выражен слабо.
АД	13 (Al)	2,65–2,75	~890	~0,23 (вклад Al)	Низкий. Низкий атомный номер и плотность, низкое сечение, высокая теплоемкость – слабый температурный отклик под облучением.
Свинец	82	11,34	130	0,17	Средний. Очень высокий атомный номер, высокая плотность, низкая теплоемкость, малое сечение поглощения нейтронов – умеренный радиационный нагрев преимущественно за счет γ -излучения.

Полученные результаты имеют важное прикладное значение. Они могут быть использованы для верификации теплотехнических моделей и тем самым повышения точности расчетов при проектировании оборудования ядерных установок. Выявленная градация материалов по уровню радиационного нагрева позволяет сделать научно обоснованный выбор конструкционных материалов и элементов измерительных систем, предназначенных для работы в условиях облучения. Перспективы дальнейших исследований заключаются в расширении номенклатуры исследуемых материалов и режимов облучения, а также в интеграции полученных данных в вычислительные модели для развития методик моделирования теплового поведения материалов под воздействием радиационного нагрева.

Финансирование

Данные исследования финансировались Агентством Республики Казахстан по атомной энергии в рамках научно-технической программы BR24792713 «Развитие атомной энергетики в Республике Казахстан».

ЛИТЕРАТУРА / REFERENCES

1. J.L. Rempe, D.L. Knudson, J.E. Daw, K.G. Condie, S. Curtis Wilkins, New Sensors for In-Pile Temperature Measurement at the Advanced Test Reactor National Scientific User Facility // Nuclear Technology. – 2011. – Vol. 175(3). – P. 681–691. <https://doi.org/10.13182/NT11-A12515>
2. B. Rossaert, T. Toyama, M. Yamazaki, K. Suzuki, M. Narui, T. Shikama, E. Sikik, P. Jacquet, S. Van Dyck, Development of a multipurpose rig for material irradiation tests in BR2 // Journal of Nuclear Materials. – 2022. – Vol. 565. – Art. 153742. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2022.153742>
3. Liu Chang, Xia Yi, Peng Xingjie, Zhao Wenbin, Song Jiyang, Jin Shuai, Liu Runqi, He Yuhao. Thermal Performance Analysis of Low Temperature Differential Flow Heat Transfer Process in HFETR Irradiation Device // J. Nuclear Power Engineering. – 2023. – Vol. 44(S2). – P. 184–187. <https://doi.org/10.13832/j.jnpe.2023.S2.0184>
4. A.V. Varivtsev, I.Yu. Zhemkov, A.V. Boev, O.V. Ishunina, Yu.V. Naboyshchikov, N.S. Poglyad, M.G. Sharonova, Computational and experimental study of an irradiation rig with a fuel heater for the BOR-60 reactor // Nuclear Energy and Technology. – 2016. – Vol. 2, Issue 2. – P. 126–131. <https://doi.org/10.1016/j.nucet.2016.05.010>
5. C. Reynard-Carette, G. Kohse, J. Brun, M. Carette, A. Volte and A. Lyoussi, Review of Nuclear Heating Measurement by Calorimetry in France and USA // EPJ Web Conf. – 2018. – Vol. 170. – Art. 04019. <https://doi.org/10.1051/epjconf/201817004019>
6. Kee Nam Choo, Man Soon Cho, Sung Woo Yang, Byung Hyuk Jun, Myong Seop Kim, Development of a Low-Temperature Irradiation Capsule for Research Reactor Materials at HANARO // Nuclear Technology. – 2016. – Vol. 195(2). – P. 213–221. <https://doi.org/10.13182/NT15-154>
7. A. Gusarov, K.L. Davis, J. Vande Pitte, B.J. Heidrich, I. Uytendhouwen, S. Van Dyck, Monitoring the temperature of reactor experiments using radiation-induced swelling in SiC // Journal of Nuclear Materials. – 2020. Vol. 542. – Art. 152535. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2020.152535>
8. Hyun Ju Jin, Tae Kyu Kim, Neutron irradiation performance of Zircaloy-4 under research reactor operating conditions // Annals of Nuclear Energy. – 2015. – Vol. 75. – P. 309–315. <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2014.08.042>
9. M. Kiritani, The need for improved temperature control during reactor irradiation // Journal of Nuclear Materials. – 1988. – Vol. 160, Issues 2–3. – P. 135–141. [https://doi.org/10.1016/0022-3115\(88\)90040-2](https://doi.org/10.1016/0022-3115(88)90040-2)
10. Erlan Batyrbekov, Vladimir Vityuk, Alexander Vurim, Galina Vityuk, Experimental opportunities and main results of the impulse graphite reactor use for research in safety area // Annals of Nuclear Energy. – 2023. – Vol. 182. – Art. 109582. <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2022.109582>
11. Gorin, N. V., Kandiev, Ya. Z., Ul'yanov, A. I., Shmakov, D. V., Shcherbina, A. N., Gaidaichuk, V. A., Kaz'min, Yu. M., Skivka, A. S., Vasil'ev, A. P., & Pavshuk, V. A. Measurement of the temperature of structural materials heated by radiation from a pulsed uranium-graphite reactor // Atomic Energy. – 2001. – Vol. 90(1). – P. 17–21. <https://doi.org/10.1023/A:1011327604237>
12. Vladimir Vityuk, Galina Vityuk, Alexander Vurim, Ruslan Irkimbekov, Ivan Kukushkin, Artur Surayev, Nurzhan Mukhamedov. Testing of a heterogeneous fuel rod in the research Impulse graphite reactor // Progress in Nuclear Energy. – 2023. – Vol. 164. – Art. 104889. <https://doi.org/10.1016/j.pnucene.2023.104889>
13. Kelsingazina R., Vityuk V., Vurim A., Vityuk G., Mukhamedov N., Tikhomirov G. Computational approaches for determining the nuclear heating value of structural materials during the irradiation at the IGR reactor // Annals of Nuclear Energy. – 2024. – Vol. 204. – Art. 110532. <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2024.110532>
14. Р.Е. Келсингазина, В.А. Витюк, Г.А. Витюк, Н.Е. Мухамедов, С.А. Должиков. Исследование нейтронно-физических процессов, определяющих характер радиационного разогрева материалов в импульсном графитовом реакторе // Вестник НЯЦ РК. – 2024. – Вып. 3 (99). – С. 56–64. [Kelsingazina R.E., Vityuk V.A., Vityuk G.A., Mukhamedov N.E., Dolzhikov S.A. Study of neutronic processes determining the nature of nuclear heating of materials in the impulse graphite reactor // NNC RK Bulletin. – 2024. – No. 3 (99). – P. 56–64. (In Russ.)] <https://doi.org/10.52676/1729-7885-2024-3-56-64>
15. Н.Е. Мухамедов, В.А. Витюк, Г.А. Витюк, А.Д. Вурим, Р.Е. Келсингазина, С.А. Должиков, Д.Т. Женис, А.С. Сураев. Расчетные исследования в обоснование возможности проведения внутриреакторного эксперимента с топливом энергетического реактора при реализации длительного режима работы реактора ИГР // Вестник НЯЦ РК. – 2024. – Вып. 4 (100). – С. 88–95. [Mukhamedov N.Ye., Vityuk V.A., Vityuk G.A., Vurim A.D., Kelsingazina R.Ye., Dolzhikov S.A., Zhengis D.T., Surayev A.S. Computational studies in support of possibility of conducting an in-pile experiment with power reactor fuel during the implementation of the long-term operation mode of the IGR reactor // NNC RK Bulletin. –

2024. – No. 4 (100). – P. 88–95. (In Russ.)]
<https://doi.org/10.52676/1729-7885-2024-4-88-95>
16. Чиркин В.С. Теплофизические свойства материалов ядерной техники. М.: Атомиздат, 1968. – 395 с. [Chirkin V.S. Teplofizicheskie svoystva materialov yadernoy tekhniki. Moscow: Atomizdat, 1968. – 395 p. (In Russ.)]
17. Bobkov V.P., Fokin L.R., Petrov E.E., Popov V.V., Rumiantsev V.N., Savvatimsky A.I. Thermophysical Properties of Materials for Nuclear Engineering: a Tutorial and Collection of Data. IAEA, VIENNA, 2008.
18. Неймарк Б.Е. Физические свойства сталей и сплавов, применяемых в энергетике, справочник. М.: Энергия, 1967. – 240 с. [Neymark B.E. Fizicheskie svoystva staley i splavov, primenyaemykh v energetike, spravochnik. Moscow: Energiya, 1967. – 240 p. (In Russ.)]
19. Mughabghab S.F. Atlas of Neutron Resonances: Resonance Parameters and Thermal Cross Sections. Z = 1–100. 6th ed. Amsterdam: Elsevier, 2018. 1400 p.
20. Mughabghab S.F. Atlas of Neutron Resonances: Resonance Properties and Thermal Cross Sections, Z = 61–102. 6th ed. Amsterdam: Elsevier, 2018. 696 p.

ИГР РЕАКТОРЫНДА МАТЕРИАЛДАРДЫ СӘУЛЕЛЕНДІРУ КЕЗІНДЕ ОЛАРДЫ РАДИАЦИЯЛЫҚ ҚЫЗДЫРУДЫ ЭКСПЕРИМЕНТТІК ЗЕРТТЕУЛЕР

**Н. Е. Мұхамедов¹, Г. А. Витюк¹, Р. А. Иркимбеков¹,
С. А. Должиков^{1*}, А. С. Сураев¹, Р. Е. Келсингазина^{1,2}**

¹ «Қазақстан Республикасының Ұлттық ядролық орталығы» РМК, Курчатов, Қазақстан

² Shakarim University, Семей, Қазақстан

* Байланыс үшін E-mail: dolzhikov@nnc.kz

Мақалада ИГР зерттеу реакторында импульстік сәулелену жағдайында радиациялық қыздыруға ұшыраған конструкциялық материалдардың үлгілерінің температурасын өлшеу жөніндегі эксперименттердің нәтижелері ұсынылған. Температураны тіркеу үшін ішіне зерттелетін үлгілер орналастырылған барынша сиретілген ортасы бар қорғаныш ампуладан тұратын реакторішілік эксперименттік құрылғы әзірленді. Термопарлар материал ішіндегі температураны өлшеу мақсатында үлгілердің құрылымына тікелей біріктірілген. Баяу балкитын материалдарды, жоғары қоспаланған болат пен алюминий қорытпаларын қоса алғанда, 12 материалдың температуралық реакциялары зерттелді. Материалдардың физикалық және радиациялық қасиеттерінің әсерін көрсететін қызудың тән заңдылықтары белгіленген. Алынған деректер жылу техникалық үлгілерді верификациялау және ядролық қондырғыларға арналған жабдықтарды жобалау кезінде есептеулердің дәлдігін арттыру үшін өзекті.

Түйін сөздер: ИГР, радиациялық қызу, конструкциялық материалдар, энергия бөлу.

EXPERIMENTAL STUDIES OF RADIATION HEATING OF MATERIALS DURING THEIR IRRADIATION IN THE IGR REACTOR

**N. Ye. Mukhamedov¹, G. A. Vityuk¹, R. A. Irkimbekov¹,
S. A. Dolzhikov^{1*}, A. S. Surayev¹, R. Ye. Kelsingazina^{1,2}**

¹ RSE “National Nuclear Center of the Republic of Kazakhstan”, Kurchatov, Kazakhstan

² Shakarim University, Semey, Kazakhstan

* E-mail for contacts: dolzhikov@nnc.kz

The paper presents experimental findings on the temperature measurement of structural material samples exposed to radiation heating during pulsed irradiation at the IGR research reactor. To record the temperature, an in-pile experimental device was specifically designed, consisting of a protective ampoule with an ultra-low-pressure environment to house the test samples. Thermocouples were embedded directly into the sample structures to enable precise temperature measurements within the materials. Temperature responses in 12 materials have been examined, including refractory metals, high-alloy steels, and aluminum alloys. Distinct heating patterns were identified that influenced by their physical and radiation properties of the materials. These results provide valuable data for refining thermal engineering models and enhancing the accuracy of calculations in the design of equipment for nuclear installations.

Keywords: IGR, nuclear heating, structural materials, energy release.

<https://doi.org/10.52676/1729-7885-2025-4-168-177>

УДК 629.039.58

ABOUT SOME PRACTICAL ASPECTS OF HANDLING WITH RADIOACTIVE WASTE FROM SMALL MODULAR REACTORS PARTICIPATING IN THE "FIRST" PROGRAM

V. V. Baklanov¹, V. A. Pospelov¹, A. V. Syssaletin², Yu. Yu. Baklanova^{1*}

¹ Branch "Institute of Atomic Energy" RSE NNC RK, Kurchatov, Kazakhstan

² RSE "National Nuclear Center of the Republic of Kazakhstan", Kurchatov, Kazakhstan

* E-mail for contacts: basalai@nnc.kz

This article provides an examination of approaches to the management of radioactive waste generated by small modular reactors. These approaches are based on the IAEA principles and take into account the experience of pilot and commercial operation of nuclear installations based on small modular reactors. The article contains comparative aspects of the production of radioactive waste at various types of nuclear installations and approaches to managing radioactive waste data.

Keywords: small modular reactors, radioactive waste, nuclear power, reactor electric power, types of radioactive waste, nuclear fuel.

INTRODUCTION

Within the framework of a joint project with the International Science and Technology Center, activities are being carried out to support energy innovation and develop technical cooperation with partner countries in the field of reliable and safe nuclear energy infrastructure. This cooperation includes support for the implementation of advanced nuclear technologies, including small modular reactors (SMRs), in accordance with the approach of the International Atomic Energy Agency (IAEA) to the implementation of a responsible nuclear energy program. The President of the Republic of Kazakhstan, Kassym-Jomart Tokayev, emphasized the need to build additional NPPs after the first one, while emphasizing interest in the construction of NPPs based on small modular reactors (SMRs) for the purpose of decentralizing the energy infrastructure [1]. Thus, Kazakhstan is considering the possibility of constructing and using small modular reactors in the energy sector [2].

Since 2012, the IAEA has been keeping records of small modular reactor (SMR) projects. The latest edition presents eighty-three projects [3, 4]. Although there are about a hundred projects in the world as of 2024, only active projects with demonstrated sustainable performance were selected for the catalog, but some of them will not even turn into real commercial products, since some projects are developed as proofs of concept or educational material.

ABOUT POTENTIAL CANDIDATE SMR TYPES FOR THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN

Candidate SMR sites

Existing SMR designs are grouped into four different technology lines: water-cooled reactors, high-temperature gas-cooled reactors, liquid metal fast reactors and molten salt reactors, and have two additional categories – floating nuclear power plants and microreactors, which can rely on the above technology lines.

Each group of SMRs has its own distinctive features.

The land-based water-cooled SMR family includes a variety of light water reactor (LWR) and heavy water reactor (HWR) designs for land-based grid applications: integral PWRs, compact PWRs, loop PWRs, BWRs, and pool-type

reactors for district heating. These designs represent mature technology, given that most large power plants in operation today use water-cooled reactors. There are currently 15 water-cooled SMR designs.

The offshore water-cooled SMR family includes concepts that can be deployed in the offshore environment, either as a floating barge-mounted unit or a submersible underwater unit. The group includes 6 offshore water-cooled SMR designs, some of which have been deployed as nuclear icebreakers. The High Temperature Gas Cooled SMR family features 14 modular HTGR designs currently under development and construction. HTGRs produce high temperature heat (≥ 750 °C) that can be used for more efficient power generation, a variety of industrial applications, and cogeneration.

The Fast Spectrum SMR family features 10 reactor designs that utilize the fast spectrum with a variety of coolant options including sodium, a heavy liquid metal (such as lead or lead-bismuth), and helium-gas.

The Molten Salt SMR family features 12 designs derived from advances in molten salt reactor (MSR) technology. MSRs promise many benefits, including improved safety due to the inherent properties of salt, a low-pressure, single-phase cooling system that eliminates the need for a large containment vessel, a high temperature system that provides high efficiency, and a flexible fuel cycle. The micro-SMR group includes 13 reactor designs designed to generate electricity, typically up to 10 MW(e). Micro-reactors can serve future niche electricity and district heating markets in remote regions, mining, manufacturing, and fisheries that have been served for decades by diesel power plants.

One of the promising areas of SMR technology development involves replacing existing and aging coal-fired plants with SMR plants. The main advantages of this direction of SMR technology implementation are the use of existing infrastructure, as well as the reduction of greenhouse gas emissions, which is relevant in light of the country's goals to achieve carbon neutrality.

Kazakhstan has a fairly large fleet of thermal power plants (TPPs) operating on coal and fuel oil (Figure 1).

ABOUT SOME PRACTICAL ASPECTS OF HANDLING WITH RADIOACTIVE WASTE FROM SMALL MODULAR REACTORS PARTICIPATING IN THE “FIRST” PROGRAM



Figure 1. Distribution of thermal power plants with a capacity of over 10 MW across the territory of the Republic of Kazakhstan

Most thermal power plants in Kazakhstan were commissioned in the 60s and 70s of the last century, and some even earlier. Many of them have not undergone major repairs and equipment modernization for decades. As a result, today the wear and tear of the main equipment at power plants reaches more than 50%. More than a third of the plants have a wear and tear of 70%–90% [5]. Therefore, considering the issue of constructing nuclear power plants with SMR in Kazakhstan in the context of replacing outdated thermal power plants is relevant and promising.

An alternative zone for the placement of SMR is Western Kazakhstan. Units with a capacity of 200–600 MW(e). This choice is dictated by the fact that the existing infrastructure will not allow higher-capacity units to operate stably and, in the event of an emergency with their disconnection from the power grid will lead to the disconnection of a large number of consumers at once [6].

SMR Selection Criteria

To identify promising SMR projects for their implementation in the energy system (ES) of the Republic of Kazakhstan, a preliminary ranking of the installations can be made according to the following criteria:

- technology: a water-cooled thermal neutron reactor (as the most common and proven technology) or a high-temperature gas-cooled reactor.
- design: ground-based (based on the specifics of the reactor's applicability in Kazakhstan).
- capacity: 50–300 MW(e) – for the possibility of use in industrial complexes) or up to 600 MW(e);

- project development: stage of completion of the licensing process, stage of construction, operation (preference for reference technology or expected by 2035).
- service life: at least 60 years;
- campaign: more than 24 months (the frequency of refueling is on average higher than for high-power reactors);
- enrichment of the core fuel: no more than 20% (in accordance with non-proliferation requirements);
- safety: seismic resistance (more than 0.2 g), presence of passive protection elements, possibility of natural circulation of the coolant.

Financial and economic parameters are not considered at this stage, since there is no reliable information on this issue, taking into account the current status of development of most SMR projects.

SMR Acceptability Analysis for the Republic of Kazakhstan

According to the IAEA [1], there are currently 6 reactor plants at advanced stages of construction that are considered preferred technologies in the subject area under consideration (participation in the FIRST program) and are in the specified range of generated electric power: BWRX-300 (GE-Hitachi Nuclear Energy and Hitachi GE-Nuclear Energy, USA-Japan), NuScale Power Module (NuScale Power LLC, USA), SMART (KAERI, South Korea and K.A. CARE, Saudi Arabia), Rolls-Royce SMR (Rolls-Royce, UK).

Table 1 below provides detailed characteristics of the SMRs under consideration.

ABOUT SOME PRACTICAL ASPECTS OF HANDLING WITH RADIOACTIVE WASTE FROM SMALL MODULAR REACTORS PARTICIPATING IN THE “FIRST” PROGRAM

Table 1. Technical and economic indicators of small and medium-power modular reactors [7–18]

Indicator Name	Magnitude (characteristic)			
Reactor	BWRX-300	NuScale	SMART	Rolls-Royce SMR
Reactor type	BWR	PWR	PWR	PWR
Coolant/moderator	H ₂ O	H ₂ O	H ₂ O	H ₂ O
Reactor thermal power, MW	870	200	365	1276
Installed electric power, MW	270–290	60	107	443
Fuel Type	UO ₂ (array 10×10)	UO ₂ (square 17×17)	UO ₂ (square 17×17)	UO ₂ (square 17×17)
Enrichment on U-235, %	3.4 (avg.) 4.95 (max.)	<4.95	<5	<4.95
Number of fuel assemblies, pcs	240	37	57	121
Average burnup GW-day/tU	49.5	>30	<54	55–60
Fuel reloading, month	12–24	24	30	18–24
Reactivity control mechanism	reactor protection control system and solid absorbers (B ₄ C, Hf, Gd ₂ O ₃)	reactor protection control system and Boron	reactor protection control system and Boron	reactor protection control system and Gd ₂ O ₃ solid burnable absorber
Safety Systems	passive	passive	passive	combined passive and active
Plant service life, years	60	60	60	60
Plant area, m ²	8 400	140 000	90 000	10 000
Reactor vessel height/diameter, m	26 / 4	17.7 / 2.7	18.5 / 6.5	11.3 / 4.5
SSE seismic resistance	0.3 g	0.5 g horizontal 0.4 g vertical peak ground acceleration	> 0.3 g & 0.18 g automatic shutdown	> 0.3 g
Approach to the final stage of the NFC	dry underground/ 5 600 m ³	a nuclear power plant spent fuel pool that provides storage of spent nuclear fuel for up to 10 years	interim storage of spent nuclear fuel at nuclear power plants	temporary storage in a NPP spent fuel pool before sending to a dry spent fuel storage facility

At this stage of considering the possibility of implementing SMRs in the Republic of Kazakhstan, the following reactors can be recommended from the technologies that are being considered within the framework of a joint project with the International Scientific and Technical Center: BWRX-300, NuScale, SMART.

In case of positive experience in construction and operation, as well as confirmation of economic parameters that meet the conditions of the Republic of Kazakhstan to ensure energy production in the medium power range (300–600 MW), the Rolls-Royce SMR reactor can be recommended for consideration.

As noted in Table 1, each of these SMR projects already has a ready-made approach to the final stage of the nuclear fuel cycle – sending irradiated nuclear fuel to temporary storage at the NPP site, then to a separate storage facility or to a spent nuclear fuel reprocessing plant, and ends with the final removal of high-level waste after SNF reprocessing.

They are discussed in more detail below.

WASTE MANAGEMENT AND DISPOSAL PLAN FOR SELECTED PLANTS

BWRX-300 (GE Hitachi, USA-Japan)

The BWRX-300 plant layout includes a central reactor building (RB) with a cylindrical shaft, surrounded by a control building (CB), a turbine building (TB), and a radioactive waste building (RW). The RB, a seismic category 1 structure, houses the reactor vessel and primary

containment. The CB contains the control systems, the TB contains the turbine and generator systems, and the RW contains the radioactive waste systems.

The BWRX-300 uses a standard approach to the BWR fuel cycle with an emphasis on efficiency and safety. It uses low enriched uranium (LEU) fuel assemblies. The plant design supports fuel cycles ranging from 12 to 24 months.

The BWRX-300 is designed for optimal resource utilization and waste management, with the goal of minimizing the consumption of non-renewable resources and reducing the generation of radioactive waste. The plant is equipped with advanced systems such as the Liquid Waste Management System (LWM) and the Off-Gas System (OGS), to minimize emissions to the environment and ensure low radiation doses to workers.

NuScale (NuScale Power Inc., USA)

The NuScale Power Module™ (NPM) is a small pressurized light-water reactor (PWR). The NuScale plant is scalable and can be built to accommodate varying numbers of NPMs to meet customer energy needs. The 77 MW(e) NPM delivers power in increments that can be scaled up to 925 MW(e) gross in a single twelve-module plant. The twelve-module configuration is the reference plant size for design and licensing. Each NPM is a stand-alone module that operates independently of the other modules in a multi-module configuration. All modules are controlled from a single control room.



1 – Reactor Building; 2 – Turbine Building; 3 – Radwaste Building; 4 – Control Building; 5 – Protected Area;
6 – Switchyard; 7 – Admin Building; 8 – Security Building; 9 – Tanks & Skids

Figure 2. BWRX-300 SMR Power Plant

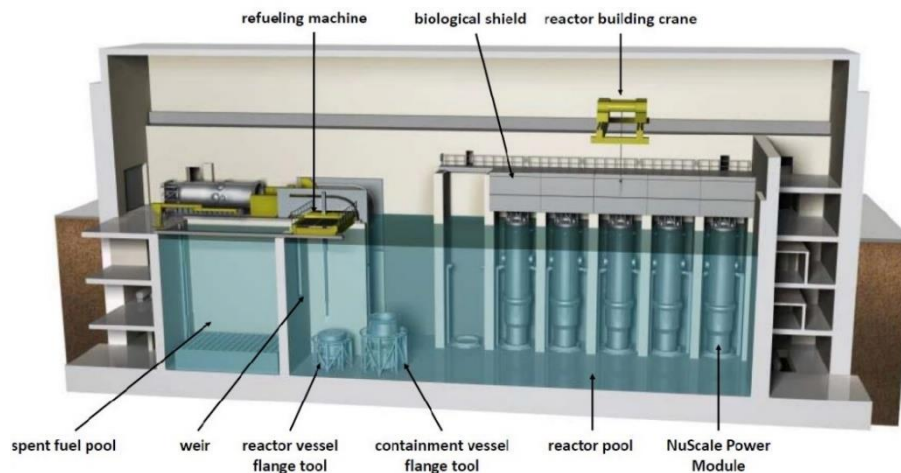


Figure 3. SMR Power Plant with NuScale NPM

The spent fuel is stored in a stainless steel lined concrete pool adjacent to the reactor pool. Its location below ground level significantly reduces the potential for cooling water loss. The NuScale spent fuel pool provides storage for up to 10 years of spent fuel, as well as temporary storage of new fuel assemblies. The pool water volume provides approximately 150 days of passive cooling of the spent fuel assemblies after the loss of all electrical power without the need for additional water.

The cleaning system reduces contaminant buildup. After about 5 years, the thermal load of the spent fuel assemblies is significantly reduced and they can be moved to a safe dry storage facility. The power plant site layout includes the allocation of space sufficient for dry storage of all spent fuel for the 60-year life of the plant.

SMART (KAERI – KEPCO and K.A. CARE, South Korea and Saudi Arabia)

The reactor name is an abbreviation for System-integrated Modular Advanced Reactor. This is a light-water

reactor with a thermal capacity of 330 MW. In the power generation mode, the station with such a reactor has a capacity of 90 MW. In the desalination station mode, the unit with the SMART reactor will produce up to 40 thousand tons of drinking water daily. Another possible application of SMART is heating of nearby areas. The SMART project combines both proven technologies and innovative solutions. The former include, for example, the use of a standard 17×17 square fuel assembly with uranium dioxide fuel, the presence of a large dry containment, the design of the control and protection system drives, and reactivity control using rods and boric acid. Among the innovative solutions, an integral layout stands out – all the main components of the primary circuit are located inside the reactor vessel. ASMM SMART actively uses the modular principle, which simplifies its construction. The station's control systems are completely digital.



Figure 4. SMART SMR Power Plant

The SMART NPP is designed with a water intake structure and other buildings including the on-site chlorination building. The power unit houses the reactor containment and auxiliary buildings (RCAB), the turbogenerator buildings and one complex building common to the two SMART units.

The RCAB houses the reactor containment, auxiliary and fuel areas to accommodate the small and modular plant concept.

The reactor containment area consists of the LCA and the UCA.

The SMART fuel cycle is 30 months. KEPCO-NF can provide SMART fuel with its fuel fabrication capacity increment schedule. SMART spent fuel is stored in a spent fuel pool using storage racks. The current storage capacity of the spent fuel storage racks is 30 years, which can be changed depending on the owner's requirements.

SMART has several design solutions to minimize the generation of radioactive waste. All liquid radioactive waste will be treated with a demineralization package, which can simplify the system design and minimize the transportation of solid waste. The gaseous radioactive waste system ensures sufficient contained decay of radioactive waste and controlled release of gases. The solid radioactive waste disposal system uses polymer curing technology, which can minimize the volumes of resin shipped.

Rolls-Royce SMR, Rolls-Royce, Great Britain

The Rolls-Royce SMR project is a medium power reactor project with an electrical power of 443 MW(e) and a thermal power of 1276 MW(t).

The Rolls-Royce SMR reactor is a pressurized light water reactor. The reactor plant is a three-loop, dual-circuit reactor with centrifugal pumps in the primary circuit.

Uranium enrichment is within the limits available for commercial light water reactors – up to 4.95%. The

reactor campaign is from 18 to 24 months. The maximum burnup is 55–60 GW×day/t.

Both active and passive safety systems are assumed. The design service life of the reactor is 60 years.

The steam generator is vertical, with U-shaped tubes.

The design features include a compact site, a modular approach to construction, and “austere and functional external systems that are resilient to hazards”. The Rolls-Royce SMR project provides for the highest possible standardization and serialization (repeatability). The production time for block modules for one block is 500 days, and the modular approach minimizes construction time on site.

The block modules can be transported by any means – roads, railways, waterways. In particular, due to this condition, the diameter of the UK SMR reactor vessel was limited to 4.5 meters in order to be able to transport it on British railways.

As it approaches equilibrium, the Rolls-Royce SMR operates on an 18-month fuel cycle with a three-batch equilibrium active bed. The spent fuel is subsequently transferred to a spent fuel pool adjacent to the containment building for storage prior to transfer to long-term dry cask storage.

Rolls-Royce SMR waste treatment systems are based on proven technologies and best available techniques. Industry lessons learned and best practice have been incorporated into the design of the systems to minimize active and inactive waste and discharges through both accepted design and operational practices.

Standardized waste treatment system components and modules are used to achieve the flexibility required for waste-informed design. Operation without soluble boron in the primary coolant allows for significant reductions in environmental discharges while simplifying the waste treatment systems.

ABOUT SOME PRACTICAL ASPECTS OF HANDLING WITH RADIOACTIVE WASTE FROM SMALL MODULAR REACTORS PARTICIPATING IN THE “FIRST” PROGRAM



Figure 5. Rolls-Royce SMR Power Plant

It should also be noted that the design and construction of nuclear facilities, such as nuclear power plants, also require compliance with very stringent safety requirements, particularly nuclear security. These requirements are driven by the need to prevent threats inherent to facilities using nuclear materials, including potential theft of nuclear material and sabotage related to both the material itself and the nuclear facility as a whole [19].

FEATURES OF FORMATION OF RADIOACTIVE WASTE USING SMR TECHNOLOGY

Classification of radioactive waste

In principle, NPPs with high-power units do not differ from SMR stations. Therefore, the production and sources of RW formation for both types of stations can be considered similar.

The source of NPP RW is the processes of fission of fuel nuclei (^{235}U , ^{233}U , ^{239}Pu) and neutron activation of various materials present in the reactor core and near-reactor space, corrosion products of structural materials, coolant and moderator impurities, fuel nuclei themselves, air in reactor rooms, etc. The overwhelming majority of radioactive substances formed during reactor operation are concentrated in the fuel.

A small portion of the fission products released during normal reactor operation from the fuel into the

coolant, and a portion of the neutron activation products formed outside the fuel elements, as a result of certain technological operations, are continuously or periodically discharged into the plant's processing and storage systems and form operational NPP RW.

NPP RW also includes waste from NPP decommissioning (dismantling of equipment, dismantling of buildings and structures, etc.).

RW is classified at all stages of RW handling: at the time of formation, during processing, during storage, transportation, when determining the method of final disposal.

NPP RW are classified in terms of their potential hazard by several parameters (Figure 6):

- by aggregate state;
- by activity and heat emission levels;
- by the half-life of radionuclides, which determines the time of their potential hazard;
- by the nature of the predominant radiation – α -emitters, β -emitters, γ -emitters (Table 2).

There are both qualitative and quantitative systems for classifying radioactive waste, developed taking into account the requirements of radiation and environmental safety, technological features of processing, transportation, storage, disposal.

Table 2. Categorization of solid and liquid radioactive waste by specific activity of radionuclides

RW Category		Specific activity, Bq/g			
		Tritium	β -emitting radionuclides (excluding tritium)	α -emitting radionuclides (excluding transuranic)	Transuranic radionuclides
SRW	Low-level	from 10^7 to 10^8	from 10^3 to 10^4	from 10^2 to 10^3	from 10 to 10^2
	Intermediate-level	from 10^8 to 10^{11}	from 10^4 to 10^7	from 10^3 to 10^6	from 10^2 to 10^5
	High-level	more than 10^{11}	more than 10^7	more than 10^6	more than 10^5
LRW	Low-level	up to 10^4	up to 10^3	up to 10^2	up to 10
	Intermediate-level	from 10^4 to 10^8	from 10^3 to 10^7	from 10^2 to 10^6	from 10 to 10^5
	High-level	more than 10^8	more than 10^7	more than 10^6	more than 10^5

ABOUT SOME PRACTICAL ASPECTS OF HANDLING WITH RADIOACTIVE WASTE FROM SMALL MODULAR REACTORS PARTICIPATING IN THE “FIRST” PROGRAM

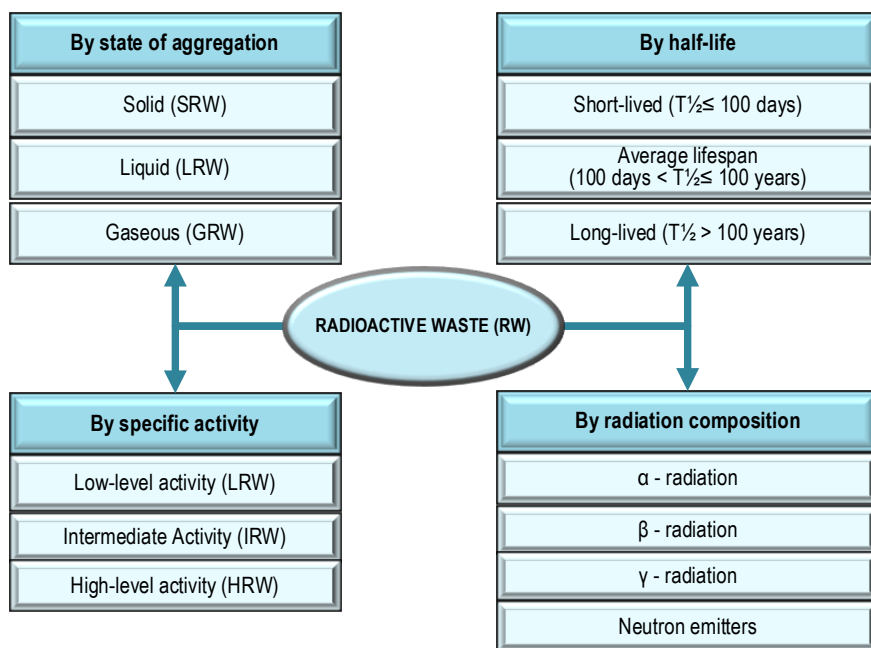


Figure 6. Classification of radioactive waste

Preliminary sorting of SRW is performed using the categorization of SRW by the level of surface radioactive contamination, as well as by the dose rate of γ -radiation at a distance of 0.1 m from the surface of the RAW:

- 1) low-level RAW – from 0.001 to 0.3 mSv/h;
- 2) medium-level RAW – from 0.3 to 10 mSv/h;
- 3) high-level RAW – more than 10 mSv/h.

Methods of handling and processing of radioactive waste

At the operational level, in addition to the mandatory classification of radioactive waste according to the degree of its potential danger, additional separation of

waste into streams within each class is carried out, which allows not only the effective use of existing processing and conditioning technologies, but also ensures the safety and quality requirements for the final forms and packaging of waste (these requirements are determined by the requirements for transportation, storage and disposal for each class of waste).

Based on these parameters, the classification of waste from the operation of NPPs in the general case is presented in Figure 7. Before final isolation, radioactive waste is processed. The known methods used at NPPs are shown in Figure 8.

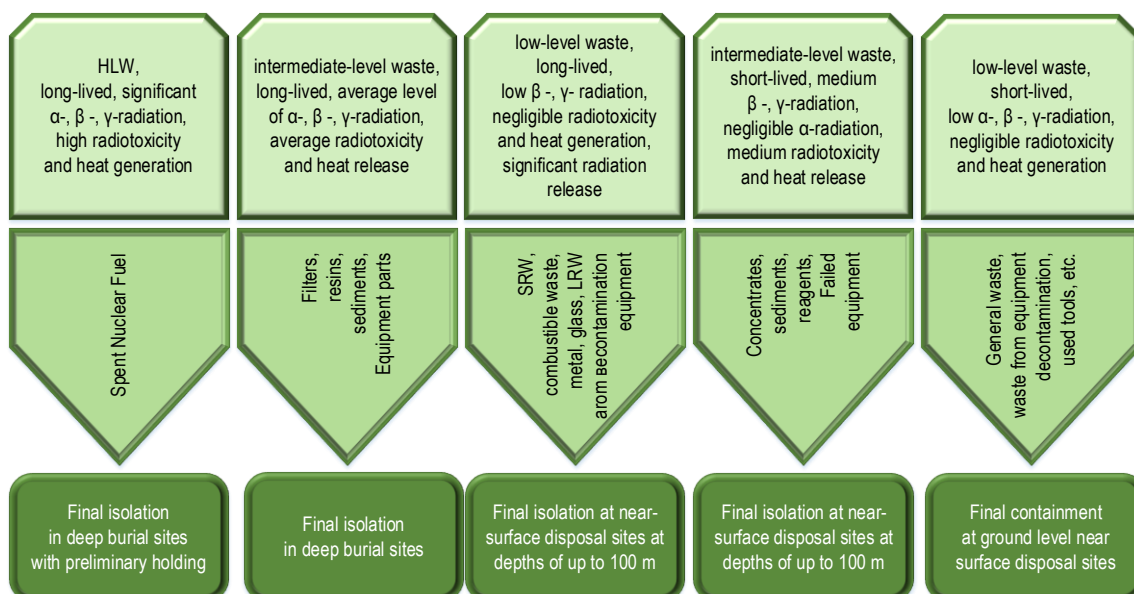


Figure 7. Scheme of handling radioactive waste of different categories

ABOUT SOME PRACTICAL ASPECTS OF HANDLING WITH RADIOACTIVE WASTE FROM SMALL MODULAR REACTORS PARTICIPATING IN THE “FIRST” PROGRAM

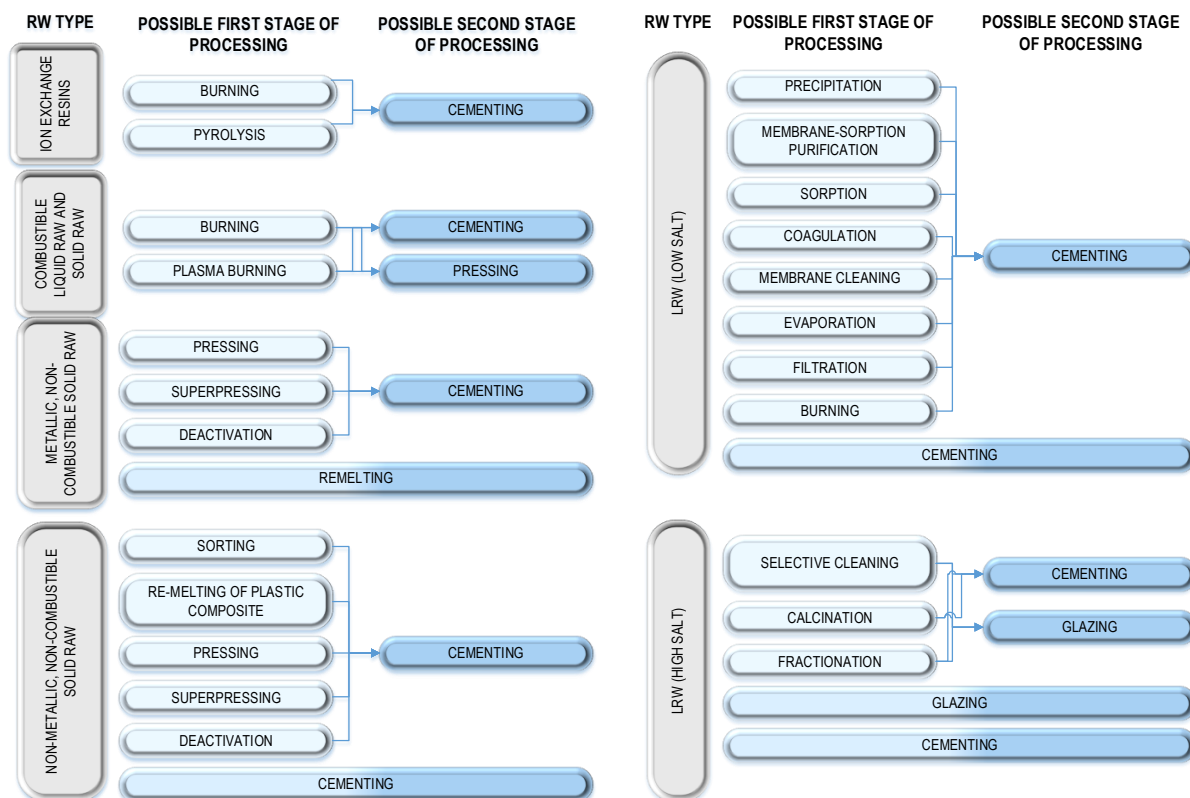


Figure 8. Methods of RW processing

RESULTS AND DISCUSSION

In general, the amount of radioactive waste generated during the operation of a nuclear power plant and during its decommissioning strongly depends on the applied handling technologies and on the country's regulatory requirements for RW handling. The figures given in various literature and sources differ by orders of magnitude.

The assessment of the generated RW volumes at SMRs was performed using the median RW generation rate for water-cooled reactors given in [20, 21] (see Table 3).

Table 3. Median RW generation rate calculation, $m^3/GW \cdot h$

RW Category	Total amount	
	LRW	SRW
Very low-level	0.0005	0.014
Low-level	–	0.009
Intermediate-level	0.018	0.0013
High-level	–	0.000023

The volume of radioactive waste generated during normal operation of SMRs based on water-moderated reactors is given in Table 4.

For each type of SMR, the volume of radioactive waste was calculated for the entire period of operation of the plant (Table 5).

It was considered that during the operation of a 1 GW NPP with a water-moderated reactor, the total volume of RW for the entire period of operation is $\approx 90 \times 10^3 m^3$, of which:

- ILW – $65 \times 10^3 m^3$;
- LLW – $25 \times 10^3 m^3$.

When decommissioning a NPP, the total volume of RW is $\approx 100 \times 10^3 m^3$, of which:

- ILW – $12 \times 10^3 m^3$;
- LLW – $88 \times 10^3 m^3$.

According to other data, on average, depending on the capacity and type of the reactor installation, it was indicated that from 0.15 to 0.35 m^3 of liquid and from 0.1 to 0.3 m^3 of solid RW per 1 MW are formed per year. When recalculated for 50 years of operation, this amounts to 7,500–17,500 m^3 of liquid RW and 5,000–15,000 m^3 of solid RW.

Table 4. Calculation of the volume of different types of generated radioactive waste per 1 MW(e), m^3/year

RW Category		SMR Type			
		BWRX-300	NuScale	SMART	Rolls-Royce SMR
LRW	Low-level	1.23	0.26	0.46	1.94
	Intermediate-level	44.15	9.46	16.87	69.85
	TOTAL	45.37	9.72	17.34	71.79
SRW	Very low-level	34.34	7.36	13.12	54.33
	Low-level	22.08	4.73	8.44	34.93
	Intermediate-level	3.19	0.68	1.22	5.04
	High-level	0.06	0.01	0.02	0.09
	TOTAL	59.66	12.78	22.80	94.39

ABOUT SOME PRACTICAL ASPECTS OF HANDLING WITH RADIOACTIVE WASTE FROM SMALL MODULAR REACTORS PARTICIPATING IN THE “FIRST” PROGRAM

Table 5. Calculation of the amount of radioactive waste that can be generated at SMR, m³

RW Category		SMR Type			
		BWRX-300	NuScale	SMART	Rolls-Royce SMR
LRW	Low-level	73.58	15.77	28.12	116.42
	Intermediate-level	2 649.02	567.65	1 012.31	4 191.13
	TOTAL	2 722.61	583.42	1 040.43	4 307.56
SRW	Very low-level	2 060.35	441.50	787.35	3 259.77
	Low-level	1 324.51	283.82	506.15	2 095.57
	Intermediate-level	191.32	40.99	73.11	302.69
	High-level	3.38	0.73	1.29	5.36
	TOTAL	3 579.57	767.05	1 367.90	5 663.39

With the introduction of strict environmental requirements and high tariffs for RW disposal by developed countries, reactor designers began to pay more attention to RW management and, at present, the European Utility Requirements require the accumulation of SRW of no more than 50 m³ per year per 1000 MW at new NPPs. For example, the average estimated amount of SRW (per year) based on the experience of Russian NPPs using the VVER-1200 reactor as an example is 51.5 m³ per year, including:

- low-level radioactive waste, m³ – 40;
- medium-level radioactive waste, m³ – 11
- high-level radioactive waste, m³ – 0.5.

As can be seen, modern data on the amount of radioactive waste generated at nuclear power plants differs by an order of magnitude from the data used previously.

CONCLUSION

The potential use of small modular reactors (SMRs) opens up new prospects for nuclear power, but the issues of radioactive waste management remain critical.

At the same time, the urgency of solving the problem of developing nuclear energy is dictated by the fact that Kazakhstan occupies a leading position in the global market for the extraction and export of uranium, the country operates research reactors, produces uranium fuel for nuclear power plants, as well as experimental nuclear fuel [25].

As noted in this article, the main sources and categories of radioactive waste at SMRs are not fundamentally different from those at traditional NPPs. The differences lie in the volumes of waste, their specific activity, and the possibilities for optimizing processing and storage systems. SMR-based plants do not create fundamentally new challenges in the field of radioactive waste management, but require adaptation of existing practices. Their widespread implementation should be accompanied by the development of a regulatory framework and processing technologies in order to ensure nuclear physical, environmental, and radiation safety throughout the entire life cycle of a nuclear facility.

REFERENCES

1. Kazakhstan Will Need More Nuclear Plants, President Says In State Of Nation Address, David Dalton, 9 September 2025, <https://www.nucnet.org/news/kazakhstan-will-need-more-nuclear-plants-president-says-in-state-of-nation-address-9-2-2025>
2. Kazakhstan to Participate in FIRST Small Modular Reactor Program as Part of Cooperation with the US. <https://www.gov.kz/memleket/entities/energo/press/news/details/401479>
3. Small Modular Reactor Technology Catalogue, 2024 Edition, A Supplement to the non-serial publication: Small Modular Reactors: Advances in Developments 2024, English IAEA/PAT/008. – 48 p. – 8 fig. <https://doi.org/10.61092/iaea.3o4h-svum>
4. Advances in small modular reactor technology developments // IAEA Advanced Reactors Information System (ARIS). – 2020. – URL: <http://aris.iaea.org>
5. Depreciation of energy infrastructure in Kazakhstan: solution to the problem and international experience. – URL: <https://dknews.kz/ru/ekonomika/359073-iznos-energeticheskoy-infrastruktury-v-kazahstane>
6. Conducting technical and economic studies to justify the construction of nuclear power plants in the Republic of Kazakhstan within the framework of the Republican budget program 049 "Preparatory work for the development of nuclear energy" Inv. No. 142 dated 21.12.2009, Kurchatov, 204 p.
7. Advanced Reactor Information System <https://aris.iaea.org>
8. Small Modular Reactors: A new nuclear energy paradigm, IAEA, <https://nucleus.iaea.org/sites/smr/Shared%20Documents/Small%20Modular%20Reactors%20a%20new%20nuclear%20energy%20paradigm.pdf>
9. Reactor installations for low-power nuclear power plants / V. V. Petrunin, JSC "Experimental Design Bureau of Mechanical Engineering named after I. I. Afrikantov, Nizhny Novgorod // Bulletin of the Russian Academy of Sciences. – 2021. – Vol. 91, No. 6. – P. 528–540.
10. Soloviev, S.L. What kind of small nuclear power plants do we need? / S.L. Soloviev; ROSENERGOATOM. – VNIIAES. – Obninsk, October 13, 2022.
11. Small modular reactors: problems and prospects / OECD: Development and economics of nuclear technologies. – NEA. – No. 7560. – 2020.
12. CNNC's ACP100 SMR: Technique Features and Progress in China / XU Bin // 13th INPRO Dialogue Forum on Legal and Institutional Issues in the Global Deployment of Small Modular Reactors, 18-21 October 2016, IAEA Headquarters Vienna Austria.
13. Design and Technology Development of CAREM for Near-term deployment, and the Status of the construction of CAREM25 prototype / Darío F. Delmastro // Gerencia de Ingeniería – Gerencia de Área CAREM, Comisión Nacional de Energía Atómica First Meeting of the Technical Working Group for Small Modular Reactor (TWG-SMR). Vienna, April 2018.
14. Zuoyi Zhang, Zongxin Wu et al. Current status and technical description of 2×250 MWth demonstration plant // Nuclear Engineering and Design. – 2009. – Vol. 239. – P. 1212–1219.

15. «CAREM Prototype Construction and Licensing Status», H. Boado Magana, D. F. Delmastrob, M. Markiewicz, E. Lopassob, F. Diez, M. Giménez, A. Rauscher, S. Halpeta, M. Chocrón, J.C. Dezzuttic, H. Pirani, C. Balbi, a Comisión Nacional de Energía Atómica Av. del Libertador 8250, (1429) Capital Federal, Argentina.
16. Salah Ud-Din Khan, Zeyad Almutairi and Meshari Alanazi. Techno-Economic Assessment of Fuel Cycle Facility of System Integrated Modular Advanced Reactor (SMART) // Sustainability. – 2021. – Vol. 13(21). – Art. 11815; <https://doi.org/10.3390/su132111815>
17. «Techno-economic Assessment for Generation III+ Small Modular Reactor Deployments in the Pacific Northwest», Mark R. Weimar, Ali Zbib, Don Todd, PNNL; Jacopo Buongiorno, Koroush Shirvan, April 2021, Prepared for the U.S. Department of Energy under Contract DE-AC05-76RL01830, Pacific Northwest National Laboratory Richland, Washington 99354.
18. Nuclear maneuvers. <https://rosatomnewsletter.com/ru/2020/09/28/nuclear-flexibility/>
19. Syssalet A.V., Baklanov V.V., Pospelov V.A. About Some Issues of Ensuring and Effectiveness Evaluation of Nuclear Security for Nuclear Power Plants Based on Small Modular Reactors // NNC RK Bulletin. – 2025. No. 3. – P. 176–182. <https://doi.org/10.52676/1729-7885-2025-3-176-182>
20. D. D. Desyatov, D. A. Terentyev, A. S. Fadeeva, A. A. Ekin, M. D. Pyshkina. Specific indicators of solid radioactive waste formation at PWR and BWR nuclear power plants // Research trajectory – man, nature, technology. <https://restrajjectory.ru/4-7.pdf>
21. A. A. Ekin, K. L. Antonov. Application of a Specific Indicator for Assessing the Volumes of Radioactive Waste Formation During Normal Operation of Russian Nuclear Power Plants // Radioactive Waste. – ISSN:2587-9707. – URL: https://radwaste-journal.ru/docs/journals/22/application_of_a_specific_indicator_for_the_estimation_of_radioactive_wastes.pdf
22. A. Syssalet, E. Batyrbekov, Y. Baklanova, V. Yermakov, R. Nauryzbayev, N. Marks, R. Kips, A. Tompson, L. Dallas, A. Stratz. Advancing nuclear forensics competencies at the National Nuclear Center of the Republic of Kazakhstan and conceptual development of a National Nuclear Forensics Library Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry (2025). <https://doi.org/10.1007/s10967-025-10452-0>

«FIRST» БАҒДАРЛАМАҒА ҚАТЫСАТЫН ШАҒЫН МОДУЛЬДІ РЕАКТОРЛАРДЫҢ РАДИОАКТИВТІ ҚАЛДЫҚТАРЫН БАСҚАРУДЫҢ КЕЙБІР ПРАКТИКАЛЫҚ АСПЕКТІЛЕРІ ТУРАЛЫ

В. В. Бакланов¹, В. А. Поспелов¹, А. В. Сысалетин², Ю. Ю. Бакланова^{1*}

¹ ҚР ҰЯО РМК «Атом энергиясы институты» филиалы, Курчатов, Қазақстан

² «Қазақстан Республикасының Ұлттық ядролық орталығы» РМК, Курчатов, Қазақстан

* Байланыс үшін E-mail: basalai@nnc.kz

Бұл мақала шағын модульдік реакторлар түзетін радиоактивті қалдықтарды басқару тәсілдерін қарастырады. Бұл тәсілдер МАГАТЭ қағидаттарына негізделген және шағын модульдік реакторлар негізіндегі ядролық қондырғыларды тәжірибелік және коммерциялық пайдалану тәжірибесін ескереді. Мақалада сондай-ақ ядролық қондырғылардың әртүрлі түрлерінде радиоактивті қалдықтардың түзілуі және радиоактивті қалдықтардың деректерін басқару тәсілдері салыстырылады.

Түйін сөздер: шағын модульдік реакторлар, радиоактивті қалдықтар, атом энергетикасы, реакторлық электр энергиясы, радиоактивті қалдықтардың түрлері, ядролық отын.

О НЕКОТОРЫХ ПРАКТИЧЕСКИХ АСПЕКТАХ ОБРАЩЕНИЯ С РАДИОАКТИВНЫМИ ОТХОДАМИ МАЛЫХ МОДУЛЬНЫХ РЕАКТОРОВ, УЧАСТВУЮЩИХ В ПРОГРАММЕ «FIRST»

В. В. Бакланов¹, В. А. Поспелов¹, А. В. Сысалетин², Ю. Ю. Бакланова^{1*}

¹ Филиал «Институт атомной энергии» РГП НЯЦ РК, Курчатов, Казахстан

² РГП «Национальный ядерный центр Республики Казахстан», Курчатов, Казахстан

* E-mail для контактов: basalai@nnc.kz

В настоящей статье приводится рассмотрение подходов к обращению с радиоактивными отходами, которые образуются в результате деятельности малых модульных реакторов. Данные подходы основываются на принципах МАГАТЭ, учитывают опыт опытной и коммерческой эксплуатации ядерных установок на базе малых модульных реакторов. В статье содержатся сравнительные аспекты по наработке РАО на различных типах ядерных установок и подходы по управлению данными РАО.

Ключевые слова: малые модульные реакторы, радиоактивные отходы, атомная энергетика, электрическая мощность реактора, типы радиоактивных отходов, ядерное топливо.

<https://doi.org/10.52676/1729-7885-2025-4-178-189>

УДК 620.9

РЕЗУЛЬТАТЫ ФОРСАЙТ-ИССЛЕДОВАНИЯ ПО НАПРАВЛЕНИЮ «ЭНЕРГЕТИКА» В РЕСПУБЛИКЕ КАЗАХСТАН: МЕЖДУНАРОДНЫЙ ОПЫТ И НАЦИОНАЛЬНЫЕ ПЕРСПЕКТИВЫ

А. С. Серикканов^{1*}, Л. Д. Байсент², М. Э. Калменов³, А. А. Кибарин⁴,
Е. В. Шевченко¹, А. А. Омирбекова⁵, С. С. Верендеев⁶

¹ Национальная Академия наук Республики Казахстан при Президенте Республики Казахстан, Алматы, Казахстан

² Казахстанско-немецкий университет, Алматы, Казахстан

³ АО «Институт развития электроэнергетики и энергосбережения (Казахэнергоэкспертиза)», Астана, Казахстан

⁴ НАО «Алматинский университет энергетики и связи имени Гумарбека Даукеева», Алматы, Казахстан

⁵ Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан

⁶ ТОО «Manul Technologies», Астана, Казахстан

* E-mail для контактов: a.serikkanov@gmail.com

В статье рассматривается роль форсайт-исследований в энергетике с акцентом на Казахстан. Энергетика определяется как ключевой фактор экономического роста, технологической модернизации и экологической устойчивости. Подчеркивается двойственная роль энергетического сектора в Казахстане, где он является не только опорой национальной экономики и экспорта, но и источником рисков, связанных с изношенной инфраструктурой, высокой энергоёмкостью и зависимостью от ископаемого топлива. Методология исследования включала анализ международных трендов, экспертные опросы и глубинные интервью с учёными и представителями отрасли. Полученные результаты позволили выявить приоритетные направления научных исследований и технологий, соответствующие глобальному переходу к низкоуглеродной и цифровой энергетике. Выводы исследования могут быть использованы для формирования национальной инновационной политики и повышения долгосрочной конкурентоспособности Казахстана.

Ключевые слова: форсайт-исследования, электроэнергетика, возобновляемая энергетика, «зелёная» экономика, методы форсайтов.

ВВЕДЕНИЕ

Современное общество развивается в условиях активной смены инновационных укладов и перехода на новые информационно-инновационные технологии, формирования эффективных наукоемких систем производства товаров и услуг, усложнения форм и механизмов конкурентной борьбы в международном и национальном масштабах, что требует повышения роли знаний и интеллектуального капитала. Однако национальные системы промышленной и научно-технической сферы Казахстана недостаточно адаптированы к условиям расширения глобальных конкурентных преимуществ и динамике инновационных и технологических трансформаций. Это наглядно подтверждают и рейтинги страны в общемировых показателях: Казахстан занимает 81-ю позицию среди 133 стран в рейтинге инновационного развития «The Global Innovation Index» [1], 73-е место среди 146-и стран в рейтинге по уровню развития экономики, основанной на знаниях (The Knowledge Economy Index) [2] и 39-е место среди 172-х стран по объемам ВВП (Gross Domestic Product (GDP)).

В этих условиях возникает необходимость обновления научных подходов к построению моделей научных исследований, повышению качества исследовательских результатов и их прогнозной вероятности с учетом современных требований глобальных рынков, внешних правил и ограничений разного уровня [3, 4].

Одной из базовых современных проактивных исследовательских технологий является форсайт [5–8].

Потенциал форсайт-исследований заключается в следующем [5]:

- объединение усилий всех заинтересованных лиц в системе выработки общего представления (образа) будущего объекта исследования (учитываются различные точки зрения ученых и экспертов и наиболее объективно отражаются все стороны исследуемой актуальной тематики);

- широкий спектр методов и инструментов проведения форсайта (возможность представления и визуализации главных свойств и характеристик объекта исследования);

- выработка эффективных путей решения проблемы, разработка «дорожных карт», которые в практическом плане будут являться четким указателем действий всех групп участников;

- прогнозы форсайта формируются широким кругом экспертов (снижает вероятность одностороннего взгляда и повышает вероятность достоверности прогнозируемого состояния проблемы, формирует основу для синергетического развития).

Энергетика занимает особое место в форсайт-исследованиях как в мире, так и в Казахстане [9, 10], поскольку именно она определяет фундаментальные условия экономического роста, технологической модернизации и экологической устойчивости. В глобальном масштабе форсайт в энергетике позволяет

прогнозировать переход к низкоуглеродным технологиям, развитие новых рынков и цепочек стоимости, а также предотвращать энергетические кризисы. В Казахстане энергетика одновременно является основой экономики и экспорта, а также источником рисков, связанных с изношенной инфраструктурой и зависимостью от ископаемого топлива [11]. Поэтому именно в этой сфере форсайт становится инструментом не только научного и технологического планирования, но и выработки стратегических решений, влияющих на конкурентоспособность страны в долгосрочной перспективе.

В экономике Казахстана сохраняется высокая зависимость от углеродных ресурсов и энергоёмких отраслей промышленности, что формирует устойчивые риски для конкурентоспособности страны в условиях глобального перехода к низкоуглеродному развитию. Одновременно международные обязательства Казахстана по достижению углеродной нейтральности к 2060 году и включение в мировые климатические инициативы требуют системных решений в области науки, технологий и инноваций, а также ускоренной системной трансформации энергетики [12–14].

В этих условиях форсайт-исследования приобретают особую значимость как инструмент стратегического прогнозирования и определения приоритетов научно-технического развития. Они позволяют выстраивать долгосрочную научную и инновационную повестку, интегрировать национальные приоритеты в глобальные технологические тренды и формировать основу для эффективной государственной политики. Несмотря на накопленный опыт, форсайт-исследования в Казахстане до сих пор не стали системным элементом стратегического планирования [15, 16].

Таким образом, актуальной задачей является совершенствование подхода к форсайт-исследованиям, который бы одновременно обеспечивал научную обоснованность, технологическую релевантность и практическую привязку к инструментам государственной политики в области науки и технологии в энергетике.

МЕТОДЫ

Проблемы форсайт-исследований в Казахстане

В Казахстане форсайт-исследования в области «Энергетика» проводились в 2013 и 2017 годах, затем был длительный перерыв, и только в 2024 году был реализован новый цикл исследований. Анализ содержания форсайт-исследований позволяет проследить эволюцию экспертных представлений о направлениях повышения энергоэффективности и сопоставить прогнозы с фактической динамикой энергопотребления и государственной политики.

Форсайт-исследования 2013 и 2017 гг. показали, что использование угля будет доминирующим еще несколько десятилетий. Поэтому одна из стратегий

развития энергетики Казахстана заключается в развитии угольных технологий. Анализ развития таких технологий показал, что имеются современные решения по безотходному сжиганию высокозольных углей с переработкой золы в строительные материалы или сырье для получения металлов.

Вторым стратегическим направлением, отмеченным в исследованиях, является рост энергоэффективности энергетического производства и внедрение ВИЭ. Отмечалось, что важно принятие нормативных документов по стимулированию энергоэффективности и внедрению ВИЭ. Нормативно правовая база в области энергосбережения и поддержки ВИЭ создана и продолжает совершенствоваться. В качестве мер энергоэффективности предлагалась разработка новых видов топлива, в том числе из биоресурсов, использование различных ресурсов для выработки возобновляемой энергии. Предлагаемая мера актуальна и сегодня, особенно в направлении развития углехимии, что позволит на первом этапе получать более экологичное топливо для ТЭС, а в последствии получать продукты переработки угля с высокой добавленной стоимостью.

Третьим стратегическим направлением, отмеченным в форсайт-исследованиях, является развитие атомной энергетики. В настоящее время в Казахстане производится сырье для атомной промышленности, а технологии по выработке атомной энергии в Казахстане не используются. Поэтому на первом этапе целесообразно провести фундаментальные исследования по разработке безопасных технологий атомной энергетики. На втором этапе – создание моделей безопасных реакторов. Третий этап обусловлен потребностью разработки промышленного образца безопасного реактора, в том числе реактора малой мощности. Данное направление выходит за пределы горизонта прогнозирования форсайт-исследований, но тем не менее его развивать необходимо именно сейчас, чтобы к 2050 году у нас были реальные безопасные технологии по атомной энергии.

На основе проведенных форсайт-исследований, и с учетом SWOT анализа были сформированы стратегии действий для направления «Безопасная, чистая и эффективная энергетика» (рисунок 1).

По результатам форсайт-исследований 2013 и 2017 годов были определены актуальные технологические направления развития энергетического сектора.

В первоочередных задачах Стратегического плана развития Республики Казахстан и экономического развития Казахстана до 2050 года определено создание новых высокотехнологичных производств по глубокой переработке углеводородного сырья на базе передовых разработок отечественной и мировой науки. Таким образом, наряду с развитием газовой и нефтяной отраслей промышленности республики, предусматривающим строительство магистральных нефте- и газопроводов для увеличения поставок нефти и газа на экспорт, загрузку и модернизацию суще-

ствующих перерабатывающих предприятий, следует развивать нефтехимическую отрасль промышленности республики.

Ужесточение экологических требований заставляет снижать использование углей (в том числе высокозольных Экибастузских углей). Учитывая большое количество угольных станций в Казахстане, основная задача состоит в том, чтобы развивать технологии по переработке угля и получения жидких и газообразных компонентов.

Для стабильного развития ВИЭ имеет решающее значение машиностроительная база. Для ее создания на первом этапе требуются экспериментальные цеха и малые заводы по производству ВИЭ казахстанского содержания. На втором этапе основное внимание следует направить на подготовку кадров и строительство заводов по производству ветроустановок, гидротурбин, солнечных коллекторов, биогазовых установок, аккумуляторов и хранилищ энергии. Важно развивать локальное энергоснабжение крестьянских хозяйств и малых предприятий на базе малых ветроустановок и солнечных коллекторов.

Развитие биотоплива позволит перерабатывать отходы производства, сельского хозяйства и населения. Биогазовые установки уже производятся во многих странах, в том числе и в России и КНР. Требуется разработка такой конструкции, которая позволяла бы получать электроэнергию.

Для стабильной работы ВИЭ требуются системы накопления электроэнергии. Также одним из важных условий является проведение исследований по созданию высокотехнологичных промышленных систем накопления электроэнергии и тепла, применительно к условиям Казахстана и по применению СНЭЭ (электрохимические, криогенные, топливные элементы и т.д.)

Угольная генерация может стать убыточной при введении санкций против использования угля в энергетике. На первом этапе внедрение энергоэффективных мероприятий в производственный цикл ТЭС позволит снизить вредные выбросы и улучшить режим их работы. На следующем этапе – внедрение систем газоочистки, газификация, замена угля на газ, в последующем переход на новые виды экологически чистого топлива. Совершенствование энергетической эффективности связано с научными исследованиями в области модернизации тепловой энергетики. НИОКР должны быть связаны не только с процессом сжигания угля и других углеводородов, но и подготовкой топлива и технологиями преобразования энергии в тепло и электричество, машиностроением, материаловедением, теплоэнергетикой.

Большие возможности повышения энергоэффективности – снижение потерь в электрических и тепловых сетях. Энергоэффективность предприятий может быть улучшена за счет использования ВИЭ и создания локальных сетей с оборудованием для хранения энергии.

Одним из важных моментов энергобезопасности является развитие водородной и атомной энергетики. Водород можно получать с использованием ВИЭ, проблема его хранения может быть обеспечена смешением водорода с метаном, использованием топливных элементов и т.д. В Казахстане имеются различные радиоактивные элементы, типа тория, которые не имеют широкого применения. Развитие данного направления атомной энергетики позволило бы нашей стране намного снизить энергоемкость экономики. Безопасное развитие атомной энергетики позволит создать основу для совершенствования научно-технической базы развития ядерных технологий, что будет способствовать сохранению и развитию «ядерной компетентности» и повысит конкурентный статус Казахстана в мире.

Учитывая результаты форсайт-исследований, можно выделить следующие актуальные технологические направления развития энергетики:

- 1) глубокая переработка углеродного сырья с развитием нефтехимической отрасли, переработка и газификация угля, и развитие углехимической отрасли;
- 2) повышение энергоэффективности производства тепла и электроэнергии;
- 3) проведение НИОКР по разработке казахстанских ВИЭ и создание сети малых производств;
- 4) создание фонда для финансирования новых технологий по энергоэффективности и ВИЭ;
- 5) разработка финансовых инструментов для стимулирования энергоэффективности и применения ВИЭ;
- 6) разработка промышленных систем накопления энергии;
- 7) разработка атомных и водородных технологий с обеспечением их безопасной эксплуатации и консервации.

Сравнительный анализ показывает, что Казахстан прошёл значительный путь в развитии практики форсайт-исследований в энергетике. Если в 2013 году акцент делался на оценке энергоёмкости экономики и формировании общих сценариев, то в 2024 году фокус сместился на конкретные направления научных исследований и их увязку с инструментами государственного финансирования. Этот переход свидетельствует о повышении институциональной зрелости и понимания роли науки в обеспечении устойчивого развития энергетического сектора.

В то же время остаются вызовы. Во-первых, приоритеты форсайта пока недостаточно соотнесены с международными технологическими трендами. Во-вторых, сохраняется ограниченная вовлечённость бизнеса, тогда как в ведущих странах именно взаимодействие науки и промышленности обеспечивает ускоренную коммерциализацию технологий. В-третьих, не сформирован механизм регулярной актуализации форсайта: быстро меняющаяся энергетическая повестка требует гибкости и адаптивности, что в Казахстане пока реализовано лишь частично.

**РЕЗУЛЬТАТЫ ФОРСАЙТ-ИССЛЕДОВАНИЯ ПО НАПРАВЛЕНИЮ «ЭНЕРГЕТИКА» В РЕСПУБЛИКЕ КАЗАХСТАН:
МЕЖДУНАРОДНЫЙ ОПЫТ И НАЦИОНАЛЬНЫЕ ПЕРСПЕКТИВЫ**

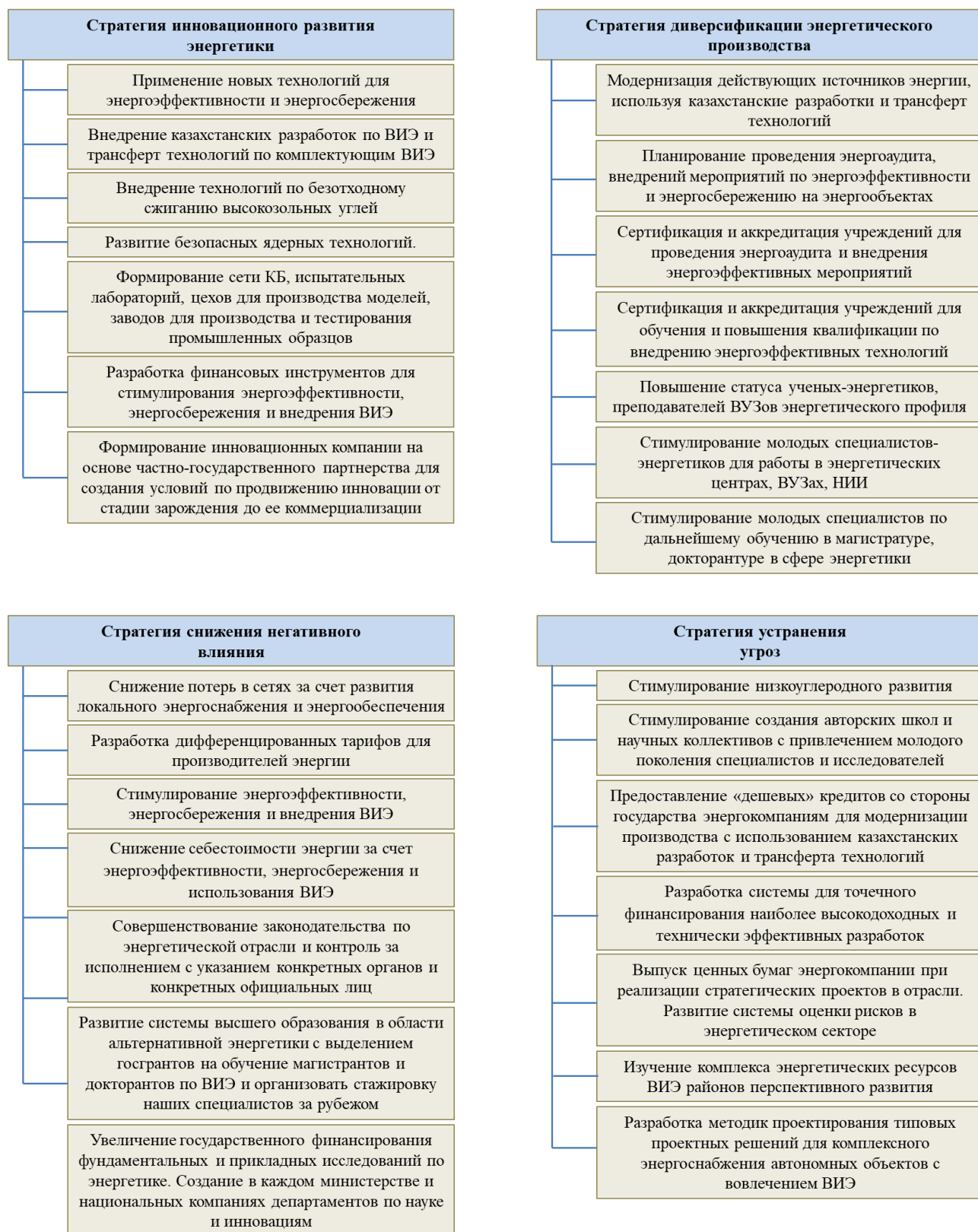


Рисунок 1. Стратегии действий для направления «Безопасная, чистая и эффективная энергетика», сформулированные на основе форсайт-исследований

Основными рекомендациями для Казахстана могут быть:

1. Институционализация форсайта как постоянного процесса (закрепление регулярности обновления форсайт-исследований (например, раз в 3–4 года) и интегрирование их результатов в стратегические документы – «Стратегию низкоуглеродного развития», «Госпрограмму развития науки» и отраслевые программы).

2. Расширение методологической базы (следует активнее использовать анализ публикационной и патентной активности, базы данных международных организаций (IEA, IRENA, EU JRC), а также методы машинного обучения для выявления зарождающихся технологических направлений).

3. Усиление связи с бизнесом и промышленностью (развитие механизма исследовательских консорциумов, где университеты, НИИ и промышленные компании совместно формируют приоритеты исследований и делят риски внедрения).

4. Фокус на критически важные технологии (для Казахстана ключевыми могут стать: системы накопления энергии, улавливание и хранение углерода (CCUS), водородные технологии, оптимизация энергопотребления в энергоёмких отраслях, в том числе в энергетике, цифровизация энергосистем).

5. Интеграция с международными инициативами (участие в региональных и глобальных технологических альянсах, доступ к передовым знаниям и финансирование для совместных проектов).

6. Формирование системы мониторинга внедрения (разработка индикаторов, которые позволят отслеживать, насколько эффективно реализуются приоритеты форсайта – как в науке (количество публикаций и патентов), так и в экономике).

Несмотря на наличие стратегических документов и форсайт-исследований, Казахстан остаётся в числе стран с наибольшей энергоёмкостью ВВП. Данные более чем 200 энергоаудитов, проведённых в 2023–2025 году, показывают, что значительная часть промышленности сохраняет устаревшие технологии и

низкую управленческую культуру в области энергосбережения. Прогнозы форсайтов 2013 и 2017 годов во многом не реализовались, поскольку в них недооценивались институциональные барьеры: слабая тарифная мотивация предприятий к модернизации, отсутствие устойчивой поддержки долгосрочных инвестиций и ограниченность компетенций регионально-го уровня управления энергосбережением.

Текущее положение науки и энергетической отрасли

Анализ состояния науки и технологий в Республике Казахстан показывает, что за последние два десятилетия наблюдается устойчивая положительная динамика в финансировании научных исследований и разработок [17]. Наибольшая доля внутренних затрат на НИОКР приходится на инженерные разработки и технологии, которые демонстрируют стабильный рост в 2004–2023 гг. (рисунок 2). Значительный прирост наблюдается также в области медицинских наук, в то время как сельскохозяйственные науки, социальные и гуманитарные дисциплины сохраняют относительно небольшие, но стабильные объёмы финансирования.

При этом доля внутренних затрат на НИОКР в ВВП страны остаётся низкой и за последние годы практически не изменилась, колеблясь в пределах 0,12–0,13%. Это указывает на ограниченный масштаб влияния науки на экономику и необходимость повышения эффективности использования ресурсов.

Вместе с тем, проведённые в рамках форсайт-исследования анкетирование и глубинные интервью с отечественными и зарубежными экспертами подтвердили, что именно инженерные и технологические направления обладают наибольшим потенциалом для формирования будущих рыночных ниш и интеграции в глобальные цепочки добавленной стоимости. Для уточнения этих перспектив были разработаны специальные опросные шаблоны («Экспертный инсайт»), позволившие выявить направления, требующие государственной и корпоративной поддержки.

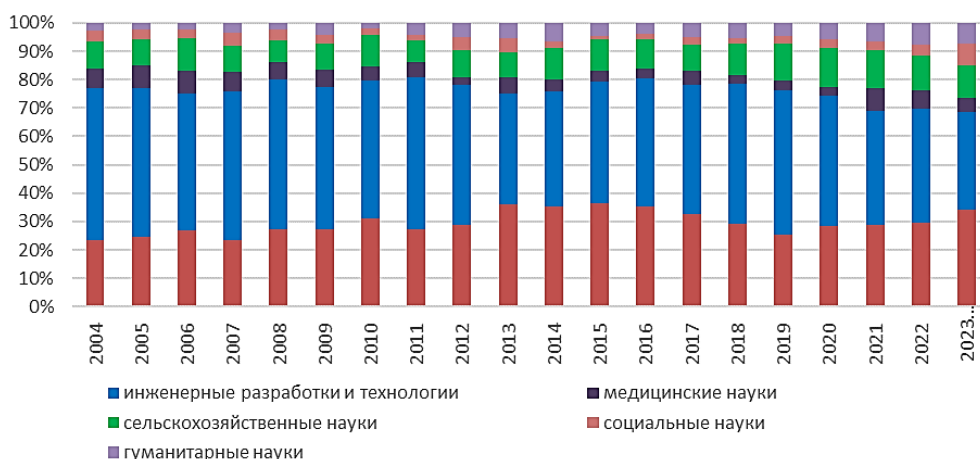


Рисунок 2. Внутренние затраты на НИОКР по отраслям науки в 2003–2023 годах

Согласно Национальному отчету по науке НАН РК за 2023 год, в рамках завершённых научных программ было получено 155 охранных документов и 1696 публикаций, из которых 387 индексировались в Scopus и 141 в Web of Science. Количество внедрённых результатов составило 260, охватывая 45 программ [18]. Анализ показывает, что патентная активность значительно ниже публикационной. В форсайт-исследованиях в Казахстане, как правило, акцентируют внимание на публикационной активности, тогда как анализ по патентной активности лишь дополняет анализ публикаций. Такой подход ограничивает возможности выявления технологических тенденций в отдельных секторах, включая энергетику, и затрудняет оценку потенциала их коммерциализации. Использование Scopus и Web of Science позволяет выделять тематические кластеры публикаций. В материалах и отчётах НАН РК за 2017–2024 гг. патентная статистика чаще рассматривается как часть общей инновационной и коммерциализационной аналитики.

В международной практике форсайт-исследования в энергетике строятся на комплексном анализе публикаций и патентов, что позволяет выявлять технологические тренды и специализацию стран.

Патенты фиксируются в агрегированном виде по количеству заявок на изобретения, полезные модели, промышленные образцы, товарные знаки, и через коэффициент изобретательской активности. Отсутствие разбиения по секторам затрудняет точное выявление технологических тенденций.

Параллельно анализ состояния электроэнергетической отрасли Казахстана выявил наличие системных проблем, ограничивающих её развитие.

Наиболее острыми остаются технические вызовы – прогнозируемый дефицит электроэнергии и мощности, высокий уровень износа генерирующего и сетевого оборудования, ограниченная пропускная способность между энергоузлами и низкий уровень цифровизации. Инвестиционные барьеры связаны с действующей системой тарифного регулирования, которая не создаёт стимулов для модернизации и не обеспечивает долгосрочной предсказуемости для бизнеса. Рыночные и регуляторные недостатки проявляются в несогласованности принципов рыночного ценообразования с административным регулированием, а также в отсутствии независимого органа, обеспечивающего устойчивое функционирование рынка.

Дополнительными факторами риска являются несогласованность экологической политики и тарифного регулирования, отсутствие механизмов финансирования экологических мероприятий, а также нехватка кадров и снижение квалификации специалистов. При этом в отрасли отсутствует специализированный научно-технический совет, способный формировать стратегическое видение и поддерживать долгосрочные решения на основе аналитики и прогнозов.

Таким образом, наука и энергетика Казахстана демонстрируют разнонаправленное развитие. С одной

стороны, усиливается внимание к инженерным и технологическим направлениям, что подтверждает их стратегическую значимость для будущей экономики. С другой – энергетическая отрасль сталкивается с комплексом вызовов, требующих системного решения. В этих условиях форсайт-исследования выступают как инструмент согласования приоритетов науки и отрасли, позволяя формировать долгосрочные ориентиры и интегрировать национальную энергетику в глобальные процессы трансформации.

Мировые тренды. Направления развития мировой энергетики. Международная практика форсайта.

Современная мировая энергетика переживает трансформацию, новый виток развития ставит задачи в части ответа на глобальные вызовы, включая обеспечение энергобезопасности, вовлеченность в очередную технологическую революцию («Индустрия 4.0»), становление современной архитектуры мировой энергосистемы, обеспечение экологической безопасности при помощи интеграции современных технологий.

В мировой энергетике прослеживаются устойчивые тенденции, которые будут сказываться в долгосрочной перспективе на следующих характеристиках отрасли: энергобезопасность, продуктовые рынки, международные стандарты, технология и техника (рисунок 3).

Как отмечается во многих зарубежных исследованиях, заключение Парижского соглашения привело к тому, что многими специалистами атомная энергетика вновь стала восприниматься как наиболее привлекательная альтернатива, поскольку атомная электрогенерация, если обеспечивается безопасная эксплуатация АЭС, позволяет вырабатывать дешёвую электроэнергию с низкими выбросами углерода.

Международное энергетическое агентство (МЭА) представило прогноз развития энергетики на 2023 г. (World Energy Outlook) [19]. По оценкам организации, технологический прогресс приведет к существенному изменению глобальной энергетической системы к концу этого десятилетия. Волатильность энергетических рынков в условиях кризиса подчеркнула важность устойчивых поставок энергоресурсов, особенно в развивающихся странах, где наблюдается наибольший рост спроса на электроэнергию.

К 2030 г. доля ископаемого топлива в мировом энергобалансе снизится до 73%, доля возобновляемых источников энергии (ВИЭ) увеличится до 50%. Ожидается, что ВИЭ будут обеспечивать до 80% всех новых энергетических мощностей, из которых 50% будут составлять солнечные фотоэлектрические системы. С 2020 г. инвестиции в «зеленую» энергетику выросли на 40%. В числе основных факторов роста инвестиционной привлекательности устойчивых проектов – стремление достичь целей Парижского соглашения по снижению углеродного следа, повысить экономическую эффективность энергетической инфраструктуры, обеспечить диверсификацию энергоснабжения.

1. Энергобезопасность

Недостаточное финансирование обновления, технического перевооружения основных фондов генерирующих мощностей и объектов энергетической инфраструктуры усугубляет ситуацию старения и высокого износа энергетического оборудования во всем мире, включая самые богатые страны

2. Продуктовые рынки

Наметившийся во многих странах переход от рынка энергии к рынку комплексных услуг в области энергоснабжения, с новыми энергетическими технологиями, ведет к росту сектора энергосервисных компаний и услуг, увеличению инвестиций в малую распределенную энергетику.

3. Международные стандарты

Энергетический сектор обеспечивает около 40% антропогенных выбросов парниковых газов и существенный объем выбросов загрязняющих веществ, что делает его одним из ключевых участников реализации обязательств в рамках Парижского соглашения по климату.

4. Технология и техника

Ключевым направлением технологического развития отрасли являются комплексные решения на основе ВИЭ и развитие технологий, повышающих энергоэффективность. Одновременно наблюдается и изменение отношения к атомной электрогенерации, которая многими экспертами воспринимается как наиболее привлекательная альтернатива

Рисунок 3. Устойчивые тенденции, влияющие на основные характеристики отрасли

По прогнозам МЭА, мировое производство атомной энергии будет расти в среднем почти на 3% в год вплоть до 2026 года, а к 2025 году достигнет нового рекордного уровня. Более половины новых реакторов, которые, как ожидается, будут введены в эксплуатацию в течение прогнозируемого периода, находятся в Китае и Индии.

Рекордное производство электроэнергии из низкоэмиссионных источников, включая атомную энергетику, должно снизить роль ископаемого топлива в обеспечении электроэнергией домов и предприятий. Ожидается, что к 2026 году на долю низкоэмиссионных источников будет приходиться почти половина мирового производства электроэнергии, по сравнению с 39% в 2023 году. В своей обновленной дорожной карте Net Zero Roadmap, выпущенной в сентябре 2023 года, МЭА пересмотрело в сторону повышения роль атомной энергетики. В обновленном сценарии чистого нулевого выброса (NZE) мощность ядерной генерации увеличится более чем в два раза и достигнет 916 ГВт в 2050 году.

На конференции по изменению климата COP28, которая завершилась в декабре 2023 года, более 20 стран подписали совместную декларацию об увеличении мощности ядерной энергетики в три раза к 2050 году. В глобальном масштабе это будет означать добавление 740 ГВт ядерных мощностей к нынешним 370 ГВт.

Анализ трендов, разрабатываемых ведущими мировыми прогностическими центрами, показал, что в настоящее время в прогнозах долгосрочного развития глобальной энергетики, рассматривается целый ряд направлений технического развития и критических технологий, способных повлиять на энергетическую ситуацию уже в ближайшие десятилетия (рисунок 4). Спектр этих технологий чрезвычайно широк, и охватывает практически все аспекты производства, преобразования, транспорта, распределения и использова-

ния топлива и энергии. При этом на первый план выходит интеллектуализация энергетики и энергопотребления в целом. В электроэнергетике, по мнению специалистов МЭА, основными направлениями трансформаций являются: дальнейшее развитие и совершенствование возобновляемой и распределенной (децентрализованной) генерации и накопителей энергии вкупе с беспроводной технологией передачи энергии на дальние расстояния; электрификация автотранспорта и теплоснабжения; создание гибких энергосистем и цифровых систем электроснабжения; технологии, обеспечивающие улавливание, утилизацию и хранение/захоронение двуокиси углерода и др.

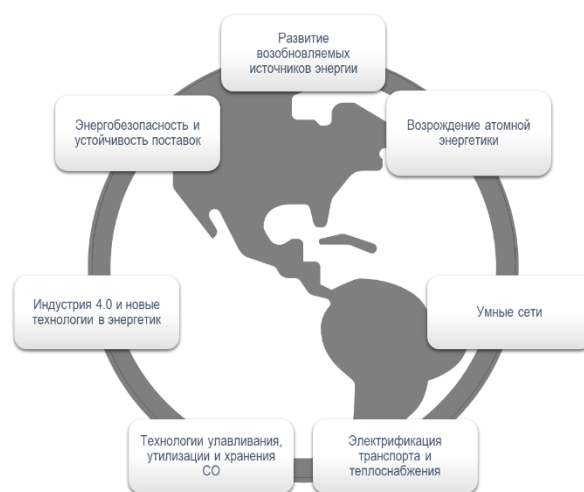


Рисунок 4. Направления технического развития и критических технологий, способных повлиять на энергетическую ситуацию уже в ближайшие десятилетия

В рамках проекта Clean Energy Technology Observatory Европейской комиссии (2024) было выявлено 77 новых технологий в энергетике, среди ко-

торых ЕС определил ключевые технологические тренды [20]. Применялся гибридный метод: интеллектуальная обработка текстов публикаций и патентов сочеталась с экспертной оценкой. Отчёт содержит описания технологий, информацию о ведущих странах по патентной активности и публикациям, а также сведения о государственной поддержке.

В 2024 году Китай подал 1,68 млн патентных заявок [21]. Китай использует патенты как индикатор приоритетных направлений развития технологий. Важно отметить, в Китае больше всего заявок на патенты подано в области генеративного искусственного интеллекта, машиностроения, управления информацией, компьютерных технологий, электротехники и медицинских технологий.

Согласно отчету ЕС и ВОИС, Китай занимает первое место по числу патентных заявок в энергетическом секторе, включая накопители энергии и «чистый уголь». Анализ отчета ЕС (2024) по методу RTA подтверждает лидерство Китая по системам накопления аккумулирующей энергии и формирование глобального технологического преимущества [22].

В США форсайт-исследования в энергетике применяются в рамках деятельности Министерства Энергетики и Национальной научной академии. Патенты (USPTO) и публикации (Web of Science) используются для прогнозирования технологических прорывов и определения направлений финансирования. Особое внимание уделяется «умным сетям», водороду и возобновляемым источникам энергии [23].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Энергетический форсайт 2024 года

Форсайт 2024 года отличался большей глубиной анализа и учётом внешних факторов – тарифной реформы, международных климатических обязательств, влияния СВАМ, а также ускоренной цифровизации энергетики. Однако остаётся открытым вопрос: станет ли он инструментом реального изменения политики или повторит судьбу предыдущих циклов, ограничившись экспертным обсуждением.

Таким образом, ключевая исследовательская проблема заключается в противоречии между наличием долгосрочных прогнозов и стратегий и устойчивостью практики низкой энергоэффективности. Изуче-

ние этого разрыва позволяет не только оценить значимость форсайтов для Казахстана, но и выявить условия, при которых они могут стать действенным инструментом государственной политики.

В рамках форсайт-сессии проведено анкетирование среди отечественных и зарубежных экспертов, работающих в Казахстане по ключевым тематикам настоящего исследования. Основными требованиями к экспертам, привлекаемым для участия в форсайт-исследованиях, были: экспертный опыт, наличие ученой степени, статей, опыт участия в конференциях, в реализации проектов и программ. По его результату был разработан шаблон опросника Экспертного инсайта для проведения глубинных интервью с представителями науки и индустрии.

В опросе сектора энергетики приняли участие всего 125 экспертов и ученых, представителей более ста отечественных и двадцати пяти международных организации и компаний, работающих в Казахстане.

По результатам анкетирования в секторе энергетика были определены новые зарождающиеся технологии, которые могут оказать влияние в ближайшие 3–5 лет: альтернативные и возобновляемые источники энергии; традиционная энергетика; наноматериалы и технологии; системы хранения энергии; атомная энергетика; водородная энергетика; ИИ и IT технологии; ВИЭ.

Согласно проведенному анкетированию, были выявлены ключевые проблемные вопросы, препятствующие развитию инноваций и новых технологий в энергетическом секторе. Основные проблемы связаны с несовершенством нормативно-правовой базы, недостаточным финансированием, нехваткой квалифицированных кадров и слабой инфраструктурой для внедрения инноваций. В таблице 1 представлены краткое описание каждой проблемы и предложенные респондентами направления их решений.

Проведено 20 глубинных интервью с ведущими исследователями, имеющими высокие показатели публикационной активности, цитируемости, а также с представителями индустрии и отраслевых ассоциаций на уровне топ-менеджмента и ведущих сотрудников с опытом работы в направлении не менее 10 лет.

Таблица 1 Результаты анкетирования в части проблемных вопросов в секторе энергетика

Проблема	Описание	Основные направления решений
Нормативно-правовая база	Сложности с регулированием, отсутствие гибкости и учета международного опыта	Совершенствование законодательства; разработка новых НПА; упрощение лицензирования и сертификации; реформа тарифной политики; интеграция цифровых технологий.
Недостаток финансирования	Ограниченные ресурсы на НИОКР, низкая инвестиционная привлекательность	Привлечение инвестиций; государственная поддержка (гранты, субсидии); разработка новых финансовых инструментов (зеленые облигации, краудфандинг).
Недостаточная квалификация персонала	Низкий уровень подготовки специалистов для работы с новыми технологиями	Актуализация образовательных программ; стажировки и международное сотрудничество; финансовая поддержка; сотрудничество вузов с бизнесом.
Недостаточная инфраструктура	Недостаток лабораторий, технопарков и научных центров для тестирования и внедрения инноваций	Создание технопарков и лабораторий; международное сотрудничество; увеличение финансирования за счет госбюджета и частных инвестиций.

По результатам глубинных интервью экспертами были сформулированы ключевые вызовы:

- декарбонизация энергетики при значительной доле угольной генерации;
- стремительный ввод в эксплуатацию генерации ВИЭ при нехватке базовых и регулирующих мощностей;
- острый дефицит квалифицированных кадров и компетенций;
- высокий износ и устаревшая материально-техническая база энергетических предприятий.

При этом эксперты отмечают преодолимость данных вызовов при наличии политической воли последовательно трансформировать энергетику; энергетический переход должен проводиться с учетом особенностей энергетического сектора Казахстана, высокой доли угольной генерации, комбинированного производства тепла и электроэнергии. Необходимо строительство крупных энергоблоков на базе экибастуских углей, а также маневренных ПГУ. Государственная поддержка в финансировании новых проектов для обеспечения экологических требований. Использование чистых угольных технологий при строительстве новых и реконструкции действующих ТЭЦ. При строительстве ВЭС и СЭС обязательно использование систем накопления энергии. Эксперты отметили потенциал развития отрасли в последовательной трансформации энергетики в устойчивую, надежную, экологически безопасную отрасль.

Эксперты определили наиболее перспективные направления прикладных исследований и разработок в Казахстане:

- чистые угольные технологии, углехимия;
- повышение энергетической эффективности и экологической безопасности существующей энергетики;
- исследования в области водородных технологий;
- исследования в области ВИЭ, промышленных систем накопления энергии;
- исследования в области ядерной и термоядерной энергетики и материаловедения.

Серьезным ограничением, отмеченным многими экспертами, для развития научных исследований в энергетике является отсутствие развитой научно-технической инфраструктуры для проведения полноценных научных исследований в большинстве ВУЗов, отсутствие отраслевого НИИ, недостаток ученых и специалистов в области электро- и теплоэнергетики.

Из технологий наибольшую перспективу и эффект от внедрения эксперты отметили цифровые технологии и искусственный интеллект, парогазовые технологии, ВИЭ, когенерацию и тригенерацию, ядерные и термоядерные технологии, технологии утилизации низкопотенциального тепла, системы промышленного накопления энергии.

Бизнес должен генерировать запрос к научному сообществу через отраслевые НИИ, центры компетенций по ключевым технологиям, куда бизнес мог бы обратиться с вопросом о разработке и внедрении технологий.

В результате форсайт-исследования и с учетом мнения экспертного сообщества были определены стратегические направления развития науки в Казахстане (рисунок 5).



Финансирование

Увеличение объемов и продолжительности финансирования научных исследований. Внедрение механизма базового финансирования ВУЗовской науки.



Кадры

Увеличение количества исследователей. Создание условий для привлечения молодежи в науку. Создание условий для привлечения зарубежных исследователей. Увеличение объемов подготовки.



Коллаборация

Международное сотрудничество. Внутренняя коллаборация. Тесное сотрудничество научных организаций, ВУЗов и энергетических предприятий.



Направления развития исследований

Повышение энергетической и экологической эффективности энергетических систем. Альтернативные источники энергии, технологии, производство и преобразование энергии на основе возобновляемых источников. Производство топлива и энергии из органического сырья, водородная энергетика. Цифровая трансформация электро- и теплоэнергетики. Исследования в области ядерной и термоядерной энергетики



Инфраструктура

Развитие научной инфраструктуры. Создание научно-исследовательских институтов, исследовательских центров при ВУЗах энергетического направления.

Рисунок 5. Направления стратегии развития науки в энергетике в Казахстане

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Форсайт-исследования являются ключевым инструментом долгосрочного планирования и стратегирования в условиях глобальной трансформации энергетики. Опыт Казахстана показывает положительную динамику: от аналитических прогнозов 2013 года к управленческому инструменту формирования приоритетов науки в 2024 году. Однако для повышения их эффективности требуется институционализация форсайта как постоянного процесса, расширение методологии, укрепление связи с бизнесом и международной научной повесткой.

Таким образом, форсайт может и должен стать не только инструментом прогнозирования, но и драйвером формирования инновационной энергетической политики Казахстана. Его регулярное применение позволит не только своевременно адаптироваться к глобальным вызовам, но и сформировать собственные конкурентные преимущества в новой энергетической реальности.

Казахстан в настоящее время использует публикационные базы для выявления научных трендов, в то время как патенты учитываются суммарно, без детализации по секторам и видам технологий. Международная практика демонстрирует эффективность комплексного подхода: сочетание анализа публикационной активности и патентной аналитики, использование индекса RTA и методов text mining позволяют выявлять технологические тренды и определять долгосрочные приоритеты развития.

В следующих форсайт-исследованиях целесообразно включить патентный блок, интегрированный с анализом научных публикаций, с акцентом на:

- разбор по секторам и технологическим направлениям;
- отслеживание динамики заявок;
- интеграцию с публикационной активностью.

Применение такого метода в Казахстане позволит выявлять текущие и потенциальные технологические тренды. Так, если в научной литературе активно публикуются разработки по определённой теме, например, «умные сети», можно прогнозировать развитие данного направления при условии наличия финансирования и грантов для внедрения инноваций и получения патентов. Аналогично, анализ патентов позволяет определить технологических лидеров: если страна или компания занимает ведущие позиции по патентам в области атомных реакторов, это свидетельствует о перспективности и стратегическом приоритете разработки таких технологий.

ЛИТЕРАТУРА

1. The Global Innovation Index [Электронный ресурс]. <http://gtmarket.ru/ratings/global-innovation-index/info> [Дата обращения 10.09.2024]
2. The Knowledge Economy Index [Электронный ресурс]. <http://gtmarket.ru/ratings/knowledge-economy-index/knowledge-economy-index-info> [Дата обращения 10.09.2024]
3. Бушуев В.В. Место структурного прогнозирования в исследованиях энергетики будущего // VII Мелентьевские чтения «Прогнозирование развития мировой и российской энергетики: подходы, проблемы, решения», Москва, 2013.
4. Кононов Ю.Д. Пути повышения обоснованности долгосрочных прогнозов развития ТЭК / Ю.Д. Кононов – Новосибирск: Наука, 2015. – 147 с.
5. Бассей М. Концептуальные основы и эффекты Форсайт-исследований: классификация и практическое применение / М. Бассей // Форсайт. – 2013. – № 3. – С. 64–73.
6. Вечкинзова Е.А. Перспективы развития ИТ-сектора Казахстана: взгляд форсайта // Друкеровский вестник. – 2021. – № 4 – С. 219–231.
7. Hajizadeh, D. Valliere Entrepreneurial foresight: discovery of future opportunities // Futures. – 2022. – No. 135, Article 102876. <https://doi.org/10.1016/j.futures.2021.102876>
8. Petrenko, Y., Denisov, I., Metsik, O. Foresight Management of National Oil and Gas Industry Development // Energies. – 2022, – No. 15(2). – P. 491. <https://doi.org/10.3390/en15020491>
9. Афанасьева М.В. Методологические основы и перспективы развития прогнозирования и форсайта как основы структурных исследований в энергетике // Драйверы энергетики: инновации и передовые технологии. – 2014. – Вып. 6. – С. 22–31.
10. Ahamer G. Applying Global Databases to Foresight for Energy and Land Use: The GCDB Method // Foresight and STI Governance. – 2018. – Vol. 12, No. 4. – P. 46–61. <https://doi.org/10.17323/2500-2597.2018.4.46.61>
11. Концепция развития электроэнергетической отрасли Республики Казахстан на 2023–2029 годы. Утверждена постановлением Правительства Республики Казахстан от 28 марта 2023 года № 263.
12. Системные исследования в энергетике: энергетический переход / Под ред. Н.И. Воропая и А.А. Макарова. – ИСЭМ СО РАН, 2021. – 594 с.
13. Энергетический переход в Казахстане – назад в устойчивое будущее // PwC Kazakhstan. Аналитический обзор. – 2022. – 66 с.
14. Национальный энергетический доклад. Kazenergy. – 2023 г. – 280 с.
15. Бушуев В.В. Развитие электроэнергетики: стратегический и постстратегический форсайт // Энергетическая политика. – 2017. – № 6. – С. 3–15.
16. Bakranova Dina, Serikkanov Abay, Dzhumadildaev Askar, Orazaliyev Kanat. Studying the approaches of European countries in foresight studies of the development of science and green technologies for adopting their experience in the context of Kazakhstan // NNC RK Bulletin. – 2024. – No. 1. – P. 4–12. <https://doi.org/10.52676/1729-7885-2024-1-4-12>
17. Бюро национальной статистики Агентства по стратегическому планированию и реформам Республики Казахстан [Электронный ресурс] – <https://stat.gov.kz/ru/> [Дата обращения 10.09.2024]
18. Национальный доклад по науке. – Астана–Алматы. – 2023. – 266 с.

19. Возобновляемая энергетика в России и мире. Краткий обзор // Российское энергетическое агентство. – 2022. – 104 с. <https://rosenergo.gov.ru>
 20. Clean Energy Technology Observatory: Carbon Capture, Utilisation and Storage in the European Union – 2024 Status Report on Technology Development, Trends, Value Chains and Markets. <https://doi.org/10.2760/0287566>
 21. Иванова И.А., Клыпин А.В. Китай превращает патенты в двигатель экономики // Институт статистических исследований и экономики знаний НИУ ВШЭ. – 2025. Доступно по ссылке: <https://issek.hse.ru/news/1048065732.html>
 22. China ranks first globally in number of invention patent applications in 2023, says World Intellectual Property Organization // Global Times. – 2024. Доступно по ссылке: <https://www.globaltimes.cn/page/202411/1322624.shtml>
 23. 2024 U.S. Patent Roundup: USPTO Grants and Filings // Parola Analytics. – 2024. Доступно по ссылке: <https://parolaanalytics.com/?lr=2024-us-patent-roundup-uspto-grants-and-filings>
- REFERENCES**
1. The Global Innovation Index [Electronic resource]. <http://gtmarket.ru/ratings/global-innovation-index/info> [Date of access 10.09.2024]
 2. The Knowledge Economy Index [Electronic resource]. <http://gtmarket.ru/ratings/knowledge-economy-index/knowledge-economy-index-info> [Date of access 10.09.2024]
 3. Bushuev V.V. Mesto strukturnogo prognozirovaniya v issledovaniyakh energetiki budushchego // VII Melent'evskie chteniya "Prognozirovaniye razvitiya mirovoy i rossiyskoy energetiki: podkhody, problemy, resheniya", Moscow, 2013.
 4. Kononov Yu.D. Puti povysheniya obosnovannosti dolgosrochnykh prognozov razvitiya TEK / Yu.D. Kononov – Novosibirsk: Nauka, 2015. – 147 p.
 5. Bassey M. Kontseptual'nye osnovy i efekty Forsayt-issledovaniy: klassifikatsiya i prakticheskoe primeneniye / M. Bassey // Forsayt. – 2013. – No. 3. – P. 64–73.
 6. Vechkinzova E.A. Perspektivy razvitiya IT-sektora Kazakhstana: vzglyad forsayta // Drukerovskiy vestnik. – 2021. – No. 4 – P. 219–231.
 7. Hajizadeh, D. Valliere Entrepreneurial foresight: discovery of future opportunities // Futures. – 2022. – No. 135, Article 102876. <https://doi.org/10.1016/j.futures.2021.102876>
 8. Petrenko, Y., Denisov, I., Metsik, O. Foresight Management of National Oil and Gas Industry Development // Energies. – 2022. – No. 15(2). – P. 491. <https://doi.org/10.3390/en15020491>
 9. Afanas'eva M.V. Metodologicheskie osnovy i perspektivy razvitiya prognozirovaniya i forsayta kak osnovy strukturnykh issledovaniy v energetike // Drayvery energetiki: innovatsii i peredovye tekhnologii. – 2014. – Iss. 6. – P. 22–31.
 10. Ahamer G. Applying Global Databases to Foresight for Energy and Land Use: The GCDB Method // Foresight and STI Governance. – 2018. – Vol. 12, No. 4. – P. 46–61. <https://doi.org/10.17323/2500-2597.2018.4.46.61>
 11. Kontseptsiya razvitiya elektroenergeticheskoy otrasli Respubliki Kazakhstan na 2023–2029 gody. Utverzhdena postanovleniem Pravitel'stva Respubliki Kazakhstan ot 28 marta 2023 goda No. 263.
 12. Sistemnye issledovaniya v energetike: energeticheskiy perekhod / Pod red. N.I. Voropaya i A.A. Makarova. – ISEM SO RAN, 2021. – 594 p.
 13. Energeticheskiy perekhod v Kazakhstane – nazad v ustoychivoe budushchee // PwC Kazakhstan. Analiticheskiy obzor. – 2022. – 66 p.
 14. Natsional'nyy energeticheskiy doklad. Kazenergy. – 2023 g. – 280 s.
 15. Bushuev V.V. Razvitie elektroenergetiki: strategicheskiy i poststrategicheskiy forsayt // Energeticheskaya politika. – 2017. – No. 6. – P. 3–15.
 16. Bakranova Dina, Serikkanov Abay, Dzhumadildaev Askar, Orazaliyev Kanat. Studying the approaches of European countries in foresight studies of the development of science and green technologies for adopting their experience in the context of Kazakhstan // NNC RK Bulletin. – 2024. – No. 1. – P. 4–12. <https://doi.org/10.52676/1729-7885-2024-1-4-12>
 17. Byuro natsional'noy statistiki Agentstva po strategicheskemu planirovaniyu i reformam Respubliki Kazakhstan [Electronic resource] – <https://stat.gov.kz/ru/> [Date of access 10.09.2024]
 18. Natsional'nyy doklad po nauke. – Astana–Almaty. – 2023. – 266 p.
 19. Vozobnovlyayemaya energetika v Rossii i mire. Kраткий обзор // Rossiyskoe energeticheskoe agentstvo. – 2022. – 104 p. URL: <https://rosenergo.gov.ru>
 20. Clean Energy Technology Observatory: Carbon Capture, Utilisation and Storage in the European Union – 2024 Status Report on Technology Development, Trends, Value Chains and Markets. <https://doi.org/10.2760/0287566>
 21. Ivanova I.A., Klypin A.V. Kitay prevrashchaet patenty v dvigatel' ekonomiki // Institut statisticheskikh issledovaniy i ekonomiki znaniy NIU VShE. – 2025. URL: <https://issek.hse.ru/news/1048065732.html>
 22. China ranks first globally in number of invention patent applications in 2023, says World Intellectual Property Organization // Global Times. – 2024. URL: <https://www.globaltimes.cn/page/202411/1322624.shtml>
 23. 2024 U.S. Patent Roundup: USPTO Grants and Filings // Parola Analytics. – 2024. URL: <https://parolaanalytics.com/?lr=2024-us-patent-roundup-uspto-grants-and-filings>

ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫНДАҒЫ «ЭНЕРГЕТИКА» БАҒЫТЫ БОЙЫНША ФОРСАЙТ
ЗЕРТТЕУ НӘТИЖЕЛЕРІ: ХАЛЫҚАРАЛЫҚ ТӘЖІРИБЕ ЖӘНЕ ҰЛТТЫҚ ПЕРСПЕКТИВАЛАР

А. С. Серикканов^{1*}, Л. Д. Байсейіт², М. Э. Қалменов³, А. А. Кибарин⁴,
Е. В. Шевченко¹, А. А. Өмірбекова⁵, С. С. Верендеев⁶

¹ Қазақстан Республикасы Президентінің жанындағы Қазақстан Республикасының
Ұлттық ғылым академиясы, Алматы, Қазақстан

² Қазақ-неміс университеті, Алматы, Қазақстан

³ «Электр энергетикасын дамыту және энергия үнемдеу институты
(Қазақэнергосарптама)» АҚ, Астана, Қазақстан

⁴ Ғұмарбек Дәукеев атындағы Алматы энергетика және байланыс университеті, Алматы, Қазақстан

⁵ Әл-Фараби атындағы Қазақ Ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан

⁶ Manul Technologies ЖШС, Астана, Қазақстан

* Байланыс үшін E-mail: a.serikkanov@gmail.com

Мақалада энергетика саласындағы форсайт-зерттеулердің рөлі, әсіресе Қазақстанға баса назар аударатын қарастырылады. Энергетика экономикалық өсудің, технологиялық жаңғыртудың және экологиялық тұрақтылықтың негізгі факторы ретінде айқындалады. Қазақстандағы энергетика секторының екіжақты рөлі атап өтіледі: бір жағынан, ол ұлттық экономиканың және экспорттың тірегі болса, екінші жағынан – тозған инфрақұрылыммен, жоғары энергия сыйымдылығымен және қазбалы отынға тәуелділікпен байланысты тәуекелдердің көзі болып табылады. Зерттеу әдістемесіне халықаралық үрдістерді талдау, сараптамалық сауалнамалар мен ғалымдар және саланың өкілдерімен жүргізілген тереңдетілген сұхбаттар кірді. Алынған нәтижелер төмен көміртекті және цифрлық энергетикаға жаһандық көшуге сәйкес келетін ғылыми зерттеулер мен технологиялардың басым бағыттарын айқындауға мүмкіндік берді. Зерттеу қорытындылары ұлттық инновациялық саясатты қалыптастыру және Қазақстанның ұзақ мерзімді бәсекеге қабілеттілігін арттыру үшін пайдаланылуы мүмкін.

Түйін сөздер: форсайт зерттеулері, электр энергетикасы, қайта жандандырылатын энергия, «жасыл» экономика, форсайт әдістері.

RESULTS OF THE FORESIGHT STUDY IN THE FIELD OF “ENERGY” IN THE REPUBLIC
OF KAZAKHSTAN: INTERNATIONAL EXPERIENCE AND NATIONAL PERSPECTIVES

A. S. Serikkanov^{1*}, L. D. Baiseit², M. E. Kalmenov³, A. A. Kibarin⁴,
Ye. V. Shevchenko¹, A. A. Omirbekova⁵, S. S. Verendeyev⁶

¹ National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan
under the President of the Republic of Kazakhstan, Almaty, Kazakhstan

² Kazakh-German University, Almaty, Kazakhstan

³ JSC “Institute for Development of Electric Power Industry and Energy Saving
(Kazakhenergoexpertiza)”, Astana, Kazakhstan

⁴ Almaty University of Power Engineering and Telecommunications
named after Gumarbek Daukeyev, Almaty, Kazakhstan

⁵ Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan

⁶ Manul Technologies Ltd., Astana, Kazakhstan

* E-mail for contacts: a.serikkanov@gmail.com

The article examines the role of foresight studies in the energy sector, with a particular focus on Kazakhstan. Energy is defined as a key factor of economic growth, technological modernization, and environmental sustainability. The dual role of Kazakhstan’s energy sector is emphasized: on the one hand, it serves as the foundation of the national economy and exports; on the other hand, it is a source of risks associated with outdated infrastructure, high energy intensity, and dependence on fossil fuels.

The research methodology included an analysis of international trends, expert surveys, and in-depth interviews with scientists and industry representatives. The obtained results made it possible to identify priority areas of scientific research and technologies aligned with the global transition toward low-carbon and digital energy. The findings of the study can be used to develop national innovation policy and enhance the long-term competitiveness of Kazakhstan.

Keywords: foresight studies, electric power industry, renewable energy, “green” economy, foresight methods.

<https://doi.org/10.52676/1729-7885-2025-4-190-197>

УДК 662.749

PREPARATION OF HIGHLY POROUS ACTIVATED CARBON WITH HIGH SPECIFIC SURFACE AREA FROM AGRICULTURAL WASTES

M. K. Skakov¹, A. Amirov^{2*}, E. Shaimardan³, S. K. Kabdrakhmanova², A. K. Gaipbergenova^{2,3*},
Zh. Sagdollar⁴, A. M. Zhilkashiniva⁴, A. Zh. Miniyazov¹, V. V. Baklanov¹, Ye. T. Koyanbayev¹,
N. M. Mukhamedova¹, G. K. Zhanbolatova¹

¹ Branch “Institute of Atomic Energy” RSE NNC RK, Kurchatov, Kazakhstan

² Satbayev University, Almaty, Kazakhstan

³ “Scientific Center of Composite Materials” LLP, Almaty, Kazakhstan

⁴ S. Amanzholov East Kazakhstan University, Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan

* E-mail for contacts: alseit.amirov@gmail.com, gaipbergenovaa8@gmail.com

Kazakhstan annually generates a significant amount of agro-industrial waste, which, due to the high content of carbonaceous compounds, can potentially become a valuable raw material for the production of activated carbon. This research considers the processing of rice husks, soya and sunflower husks into activated carbon. Potassium hydroxide (KOH) was used for activation to achieve high specific surface area. The obtained activated carbon samples from rice husk, soybean husk and sunflower husk were characterized by BET, SEM, XRD, energy dispersive analysis, TGA and DSC. The synthesized activated carbons possessed a developed porous structure with specific surface area: 2363.7 m²/g (RH), 786.1 m²/g (SfH), 642.4 m²/g (SBH), which was confirmed by the above analyses. These findings highlight the potential of agro-industrial waste as a sustainable source for high-performance activated carbon production. This study demonstrates a sustainable pathway for converting agro-industrial residues into high-performance activated carbon suitable for environmental and industrial applications.

Keywords: agricultural waste, activated carbon, pyrolysis, circular economy, waste recycling.

INTRODUCTION

In Kazakhstan, the processing of plant-based agricultural wastes remains insufficiently developed. Meanwhile, their ongoing accumulation poses an increasingly significant environmental challenge, despite the high potential of these wastes as raw materials for the production of valuable carbon-based materials. According to the Concept of Kazakhstan's transition to a “green economy” it is planned to recycle at least 40% of waste by 2030 and up to 50% by 2050. This corresponds to the international Sustainable Development Goals [1]. Based on the above, in this work, we have considered the possibility of optimizing the method of obtaining activated carbon from agricultural waste to achieve high specific surface area and sorption capacity. This will allow us to expand the use of agricultural waste in Kazakhstan and create an effective carbon material for use in various fields.

Thus, in Kyzylorda region they have started to actively study ways of recycling rice husk, the annual volume of which is up to 80,000 tonnes. A number of reuse technologies are being introduced here. For example, Abai Daulet LLP turns husks into a feed additive that reduces the risk of gastrointestinal disorders in cattle. In addition, rice husks and straw are used to produce biofuel in the form of high-calorie pellets, which is extremely important for areas without gas [2]. Technologies have also been created for the production of biochar and silicon dioxide, which is used as a biofertiliser to improve soil structure and reduce its salinity, and silicon dioxide is used in industry, like glass, ceramics, abrasives [3].

Kazakhstan also recycles biomass waste such as sunflower husks. For example, the oil extraction plant of

Altyn Shygys LLP processes about 1.4 thousand tonnes of sunflower husks and makes fuel pellets from the residues and uses them as biofuel for its own energy needs. This allows the plant to reduce fuel costs and reduces its carbon footprint. The plant workers note that there are no unpleasant odours when burning such fuel [4]. As for the processing of soybean husks, this area is still underdeveloped in Kazakhstan, which opens up the possibility of finding methods and ways of recycling.

Along with the discoveries already made, one of the promising ways of processing agricultural by-products is the production of activated carbon [5]. Activated carbon is one of the most popular sorbents, used as an effective carrier for catalysts in various chemical processes. Due to its high porosity and high specific surface area, it is widely used in various industries. For example, in the purification of various environments from heavy metals and pollutants, and can also find applications in medicine and as a carbon carrier for catalysts [6–9]. The relevance of finding alternative sources of raw materials is due to the depletion of traditional resources, which makes plant wastes from agriculture and food industries such as straw, husks of rice, soybean, corn and sunflower as promising replacement materials [10–12].

There are many studies that support the potential of utilising agricultural wastes to produce highly porous material. For example, *Mubinul Islam et al.* successfully synthesised microporous activated carbon from sunflower husk by chemical activation method using KOH, at 800 °C. The resulting activated carbon showed great potential as a solid desiccant material for capturing water vapour from humid air and also showed high efficiency in removing mercury

ions from aqueous solutions [13]. Similar results were obtained by *Schneider Lara Talita et al.* who investigated the effect of different thermochemical activation conditions on the formation of meso- and microporous structure of activated carbon from soybean husk. The experimental results showed that optimisation of activation parameters promotes the production of carbon material with increased specific surface area and uniformly developed porosity, which ensures its high efficiency in metronidazole adsorption. The authors concluded that the synthesised activated carbon shows better sorption properties compared to commercial analogues, which confirms its significant potential for use in environmentally friendly water treatment methods [14]. In addition to its application in water treatment, biomass activated carbon can be used as a carbon carrier with high energy density [15]. Carbon carriers represent some of the most promising catalyst materials due to their high purity, well-developed porous structure, significant specific surface area and high reactivity. These carbon materials are resistant to acidic and alkaline environments, which makes them economically and environmentally advantageous, especially for the recovery of components from spent catalysts. A widely used carrier is activated carbon (AC), which has high porosity and specific surface area (500–2500 m²/g), which is the optimum parameter for adsorption [16].

The obtained activated carbon was investigated by the following methods: BET analysis, scanning electron microscopy (SEM), energy dispersive analysis (EDA), thermogravimetric analysis and differential scanning calorimetry (TGA and DSC), X-ray diffraction method (XRD analysis).

1 MATERIALS AND METHODS

1.1 Characterization of raw materials

Rice husk from Kyzylorda oblast and soya bean and sunflower husks from East Kazakhstan oblast were selected as raw materials for the production of activated carbon. Potassium hydroxide (KOH) (KHIMPEK, Russia) in solid form was used as activating agent at the ratio of biomass and activator 1:4 (feedstock : KOH).

The primary processing steps include cleaning the biomass from impurities like dirt, sand, stones and organic contaminants. It was washed with distilled water and dried at 105 °C for 24 hours. The cleaned material was then ground in an analytical mill (A 11B, IKA, Germany) to a particle size of approximately 0.9±0.3 mm. The obtained material was used for the synthesis of activated carbon.

1.2 Method of production of activated carbon

Activated carbon (AC) has been produced by pyrolysis. Pyrolysis, the predominant method, involves heating the material in an oxygen-free environment, causing thermal decomposition and the formation of carbon, which is subsequently activated by chemical agents. This process not only optimises the adsorption properties of the coal, but also recycles the by-products of the production process, helping to reduce the environmental load.

The crushed feedstock is placed in a muffle furnace where it undergoes thermal decomposition and is converted into charcoal within an hour. To determine the optimum pyrolysis temperature, experiments were conducted at temperatures of 300 °C, 400 °C, 500 °C, 600 °C. After investigating different temperatures, the most optimum conditions were found, namely pyrolysis at 600 °C in an inert medium with nitrogen gas supply. To obtain activated carbon, the obtained product was mixed with potassium hydroxide. The mixture was then subjected to heat treatment in a muffle furnace at 750 °C under nitrogen atmosphere providing inert conditions [17, 18]. To remove alkali residues, the carbon was washed with a solution of 1% hydrochloric acid, for 2 hours at 50 °C. The material was then washed with hot water (~70–80 °C) and dried in a desiccator at 100 °C for 60 minutes (AC) [19, 20]. As a result of the thermal and chemical treatment, the modified activated carbon was obtained.

1.3 Research methods

The specific surface area and pore structure of activated carbon samples were determined using a high-performance BET analyser (BSD-660). The morphology and structure of activated carbon obtained from sunflower, soybean and rice husks were investigated using a Zeiss Auriga Crossbeam 540 high-vacuum scanning electron microscope (SEM) (Germany). The elemental composition of the materials was analysed using Thermo Fisher Scientific (USA) energy dispersive spectroscopy (EDS) system. Phase and structural analyses of the obtained samples were carried out on X'PertPRO diffractometer (Malvern Panalytical Empyrean, Netherlands). Monochromatised copper radiation (CuK α , λ = 1.54060 Å) at a scanning speed of 0.02° per second was used. The ICDD PDF-4/AXIOM database was used for phase identification. Thermal properties of activated carbon samples were analysed on a LabsysEvo instrument (Setaram, France) in argon atmosphere in accordance with GOST R 55134-2012 standards. Crystallisation and melting of the samples were studied under nitrogen flow.

2 RESULTS AND DISCUSSIONS

2.1 Physicochemical structure of activated carbon (AC)

2.1.1 Textural characteristics of AC: BET analysis

The textural characteristics of the initial activated carbon according to nitrogen adsorption isotherms are presented in Table 1 and Figure 1 (a, b, c). According to the data obtained, AC from rice husk can be classified as mesoporous, and AC from soybean and sunflower husks can be classified as microporous. From Table 1 and the graph, it can be seen that rice husk (a) has a specific pore surface area of 574.6 m²/g. And the specific pore surface area of activated carbon from sunflower husk (b) and soya husk (c) was 464.4 m²/g and 255.6 m²/g respectively. The average pore size of activated carbon from rice husk lies within 2.52 nm, from sunflower husk 2.86 nm and from soya husk 1.55 nm (Table 1).

PREPARATION OF HIGHLY POROUS ACTIVATED CARBON WITH HIGH SPECIFIC SURFACE AREA FROM AGRICULTURAL WASTES

Table 1. Characteristics of porous structure of initial AC

Sample	Specific pore surface SW, m ² /g	Pore radius Dv(r), mm	Total pore volume V _p , cm ³ /g
AC (RH)	574.6	2.52	0.50
AC (SFH)	464.4	2.86	0.19
AC (SbH)	255.6	1.55	0.11

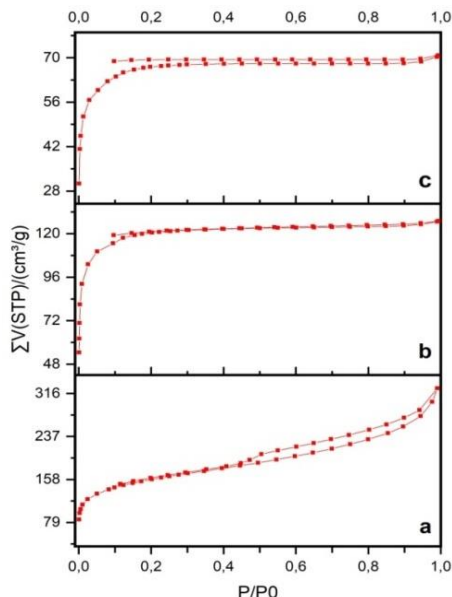


Figure 1. N₂ adsorption-desorption isotherms of activated carbon: (a) rice husk; (b) sunflower husk; (c) soy husk

2.1.2 SEM analysis of activated carbon

The results of SEM with energy dispersive analysis are shown in Figure 2 (a, b, c) and Table 2. Based on the SEM analysis, it was found that the obtained activated carbon has a clearly distinguishable porous structure, which includes meso- and micropores and a minor amount of macropores, which is comparable to the results of BET analysis.

EDS analysis identified the elemental composition of coal samples obtained from rice, soya and sunflower husks. The elemental composition of the obtained coals is presented in Table 2. Peaks corresponding to carbon, oxygen, and impurities such as potassium, magnesium, calcium and iron are observed on the EDS spectra (Figure 2). All samples have a high carbon content, which is characteristic of activated coals. SEM-EDS allowed visualising the surface of the material at the macro- and nano-level, and also allowed analysing its elemental composition (Figures 3).

Table 2. Result of energy dispersive analysis of activated carbon obtained from the feedstock: rice husk (RH), sunflower husk (SFH) and soya husk (SbH)

Sample	Elements (mass, %)					
	C	O	K	Mg	Ca	Fe
AC (RH)	91.92±0.07	6.86±0.07	0.64±0.01	0.08±0.01	0.37±0.01	0.13±0.01
AC (SFH)	91.09±0.06	7.88±0.07	0.75±0.01	—	0.28±0.01	—
AC (SbH)	89.85±0.06	8.39±0.07	0.76±0.01	0.24±0.01	0.57±0.01	0.19±0.01

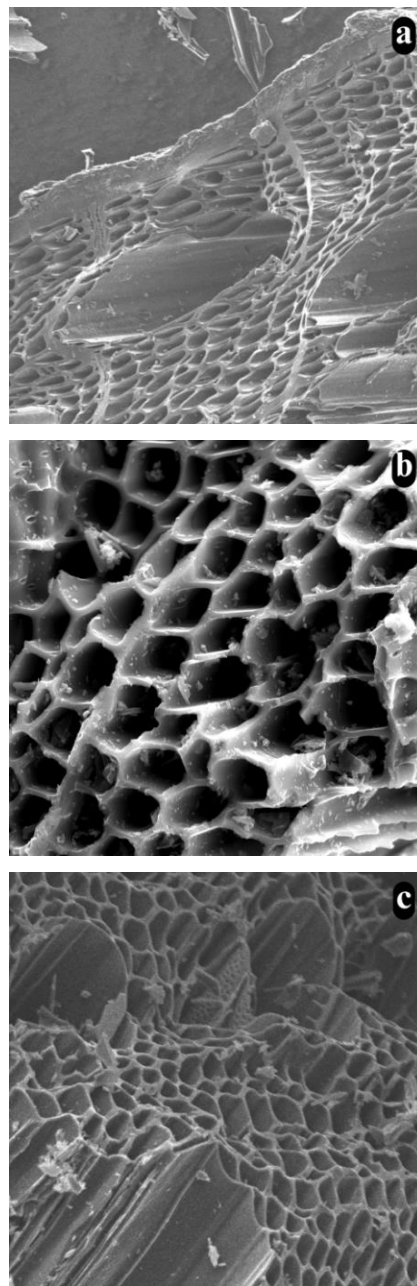


Figure 2. SEM micrographs with EDS analysis of activated carbon: (a) rice husk; (b) sunflower husk; (c) soy husk

2.1.3 XRD of activated carbon

The SEM data with energy dispersive analysers and textural characteristics were confirmed by X-ray phase analysis (XRD) results. The XRD analysis of activated carbon is presented in Table 3 and Figure 3. The activated carbon is amorphous in structure, which we verified by performing X-ray phase analysis (XRF). The spectrum of the sample from rice husk (a) shows broad peaks in the region of 24–26° 2θ and 45° 2θ, indicating the presence of a partially ordered graphite-like layer, and the moderate intensity of the peaks indicates a small number of crystalline regions. And the peak in the 73–75° region may indicate non-carbonaceous residual minerals, which

we observed in the EDS analysis. The sunflower husk sample (b) shows more pronounced peaks at $23^\circ 2\theta$ and $43^\circ 2\theta$, this indicates a more pronounced degree of crystallinity, and also small peaks in the range of $60\text{--}65^\circ$, may indicate minor residual mineral inclusions. In the case of soya husk sample (c), the peaks in the $23^\circ 2\theta$ and $43^\circ 2\theta$ region are weaker, indicating a more chaotic amorphous structure. And the additional weak peak in the range of $50\text{--}55^\circ 2\theta$ may be due to residual non-carbon impurities or microcrystalline inclusions, which was confirmed with EDS analysis.

Table 3. Values of interfacial and D-interfacial AC distances between atoms

Pos. [$^\circ 2\theta$]	Height, cts	FWHM Left, $^\circ 2\theta$	d-spacing, Å	Rel. Int., %
26.625	3.85	0.0900	3.78073	3.35
45.675	18.45	0.5904	3.04879	16.06
43.7044	26.91	0.3936	2.07122	23.43
55.9856	15.81	0.7872	1.79122	13.76

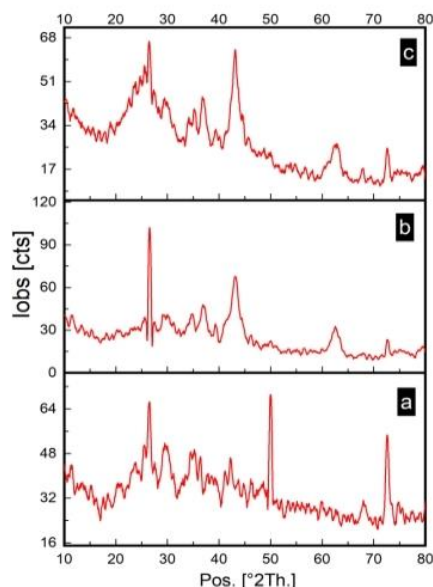


Figure 3. X-ray phase analysis of activated carbon: (a) rice husk; (b) sunflower husk; (c) soya husk

2.1.4 Thermogravimetric analysis

Figure 4 shows the results of thermogravimetric analysis (TGA) and differential scanning calorimetry (DSC) of activated charcoal obtained from different types of biomass. For coals from rice husk, a gradual decrease in mass is observed starting at 70°C and temperature up to 500°C , followed by a sharp decrease in mass at an average of $500\text{--}630^\circ\text{C}$. In the case of sunflower husk charcoal, thermal degradation is observed in three temperature ranges: $55\text{--}160^\circ\text{C}$, $340\text{--}500^\circ\text{C}$ and $550\text{--}750^\circ\text{C}$. In the temperature range (up to 160°C), the reduction is due to low release of hygroscopic moisture and desorption of adsorbed water. Two intervals of thermal mass loss are observed for the applied soya husk charcoal: $50\text{--}190^\circ\text{C}$ and $380\text{--}780^\circ\text{C}$. The design of the mass media is

related to moisture removal, the main decomposition process of components and minerals occurs at $380\text{--}780^\circ\text{C}$.

These results are consistent with previously published studies in which TGA accounts for the three- or four-stage nature of biochar decomposition due to continuous moisture desorption, pyrolysis of volatile methods, degradation of carbonised structures and thermal effects of inorganic components.

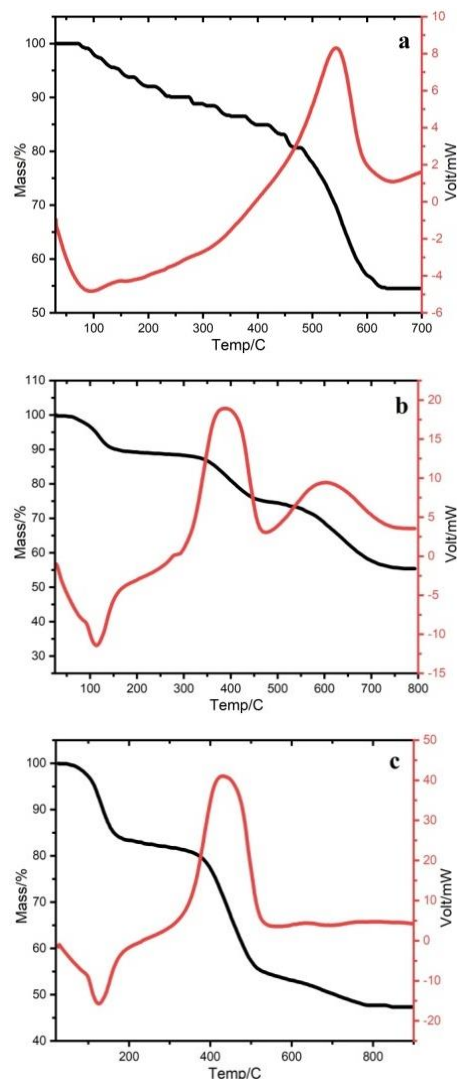


Figure 4. Thermogravimetric curve and differential scanning calorimetry of the initial coal from the starting materials: (a) rice husk; (b) sunflower husk; (c) soya husk

2.2 Physicochemical structure of modified activated carbon (AC)

2.2.1 Textural characterisation of the activated carbon. BET analysis

The textural characteristics of the modified activated carbon obtained from nitrogen adsorption isotherms are presented in Table 4 and Figure 5. Prior to the BET measurements, all samples were degassed at 300°C for 180 min. According to the analysis, after modification with potassium hydroxide, the structure of activated carbon from rice husk disappeared micro pores and more

mesopores and the appearance of macropores is observed. This is confirmed by the high specific pore surface area of 2363.7 m²/g and average pore radius of 1.43 nm. At the same time, the modified activated carbon from soya and sunflower husks retains a predominantly microporous structure with few mesopores, as reflected by their specific surface area of 642.4 m²/g and 786.1 m²/g, respectively, and pore radii of 1.37 nm and 1.27 nm. The total pore volume also differs, with the activated carbon from rice husk reaching 1.61 cm³/g, whereas the activated carbon from soybean and sunflower husk is 0.25 cm³/g and 0.35 cm³/g, respectively. Thus, modification with potassium hydroxide significantly increased the specific pore surface area and pore volume of activated carbon, favouring the formation of meso- and microporous structure.

Table 4. Characteristics of the porous structure of AC_m modified activated carbon obtained from rice husk (RH), sunflower husk (SFH) and soya husk (SbH).

Sample	Specific pore surface SW, m ² /g	Pore radius Dv(r), nm	Total pore volume V _p , cm ³ /g
AC _m (RH)	2363.7	1.43	1.61
AC _m (SFH)	786.1	1.27	0.35
AC _m (SbH)	642.4	1.37	0.25

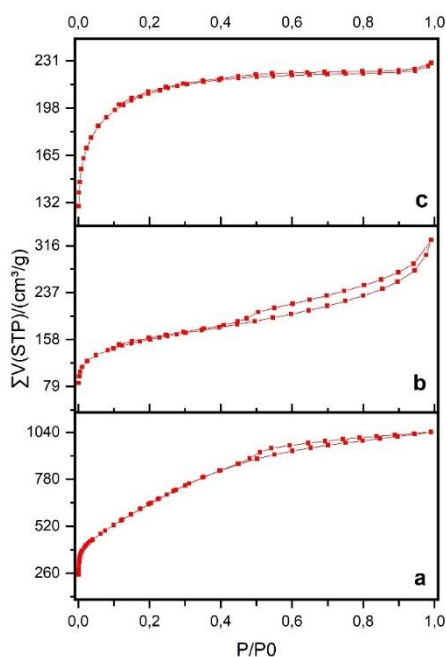


Figure 5. N₂ adsorption-desorption isotherms of modified activated carbon AC_m: (a) rice husk; (b) sunflower husk; (c) soya husk

2.2.2 SEM analysis

Figures 7 and 8 and Table 5 show the results of SEM with energy dispersive analysis. When the activated carbon was modified with potassium hydroxide, slight changes in the morphology of the carbon material were observed (Figure 6).

As a result, a decrease in the number of different debris is observed, the structure becomes more cellular and organised, the lines become clearer, and the number of white particles on the pore surface decreases. An increase in the number and size of pores is observed, which acquire a regular shape and uniform size [8, 21, 22]. In places, the formation of macropores can be observed (Figure 6a, c).

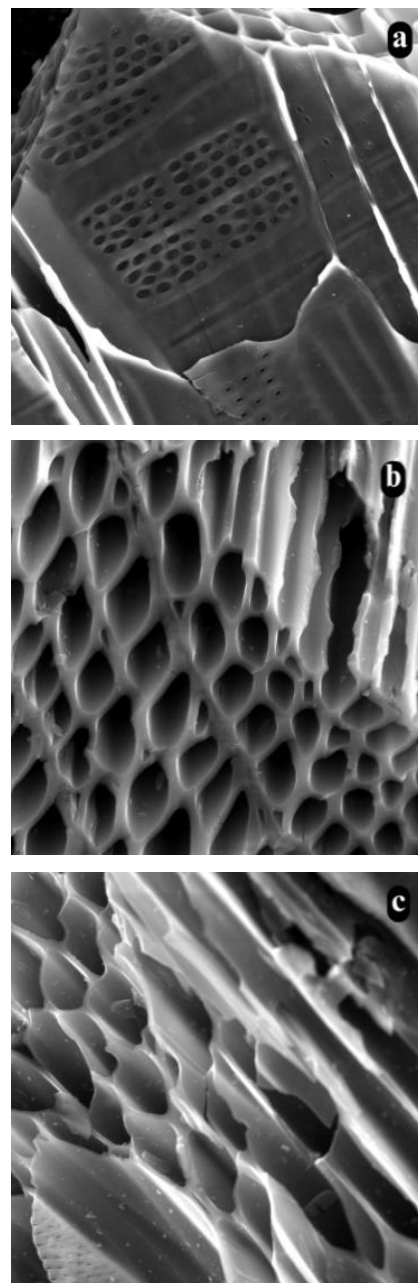


Figure 6. SEM micrographs with EDS analysis of modified activated carbon: (a) rice husk; (b) sunflower husk; (c) soya husk

The EDS analysis showed that after modification such elements as magnesium and iron are absent in the activated carbon (Table 5).

PREPARATION OF HIGHLY POROUS ACTIVATED CARBON WITH HIGH SPECIFIC SURFACE AREA FROM AGRICULTURAL WASTES

Table 5. Result of energy dispersive analysis of activated carbon modified with hydrochloric acid

Sample	Elements (mass, %)					
	C	O	K	Mg	Ca	Fe
AC _m (RH)	89.90±0.04	9.86±0.05	0.09±0.00	–	0.15±0.00	–
AC _m (SFH)	80.89±0.08	18.60±0.13	0.11±0.01	–	0.40±0.01	–
AC _m (SbH)	88.81±8.81	10.79±0.79	0.2390.01	–	0.1790.01	–

3.2.3 XRD X-ray diffraction analysis

Analysis of the data obtained by XRD analysis confirmed that the modified AC is an amorphous solid. It possesses a large internal surface area and pores of a certain size. It can be seen that the original AC and the modified AC_m have a similar appearance from the XRD diffraction result (Figures 3 and 7).

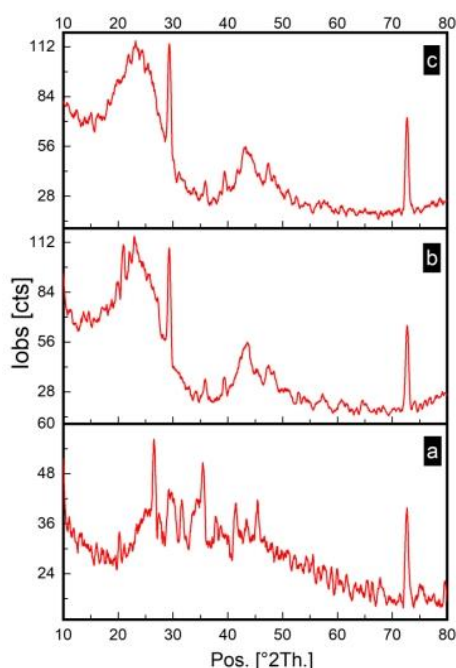


Figure 7. XRD X-ray diffraction analysis of AC_m

The spectra of all three samples (Figure 7) showed approximately the same peaks [21], indicating their similar structural organisation. X-ray diffraction analysis of the activated carbon revealed broad asymmetric peaks in the ranges of 15–35 and 40–50, indicating the shape of typical amorphous carbon. This suggestion is consistent with the scanned micrograph images of the activated carbon shown in Figure 6. This showed that the activated carbon AC originates from carbon material and is an amorphous carbon with many pores.

Table 6. Values of interfacial distances of AC_m and d-between atoms

Pos., °2θ	Height, cts	FWHM Left, °2θ	d-spacing, Å	Rel. Int., %
23,8687	1.96	0.0900	3.72502	1.59
44,0859	2.68	0.0900	2.05248	2.17
51,4593	1.75	0.0900	1.77437	1.42

2.2.4 Thermogravimetric analysis

Figure 8 shows the results of thermogravimetric analysis of the modified activated carbon AC_m. As can be seen from the figure, the decrease in the bulk of the primary activated carbon occurs in the temperature range of 90–120 °C to 420–700 °C for the rice husk sample, and in the ranges of 60–150 °C and 440–670 °C for the sunflower husk sample.

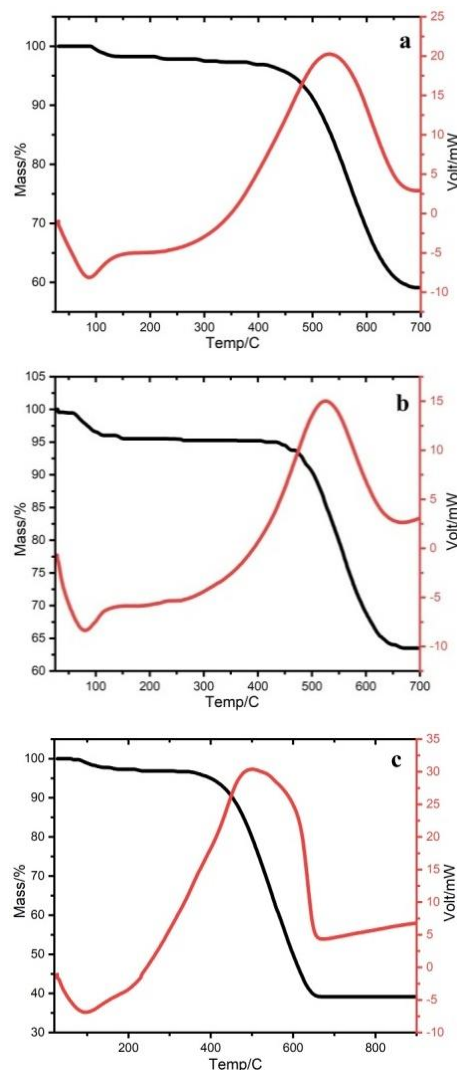


Figure 8. Thermogravimetric curve and differential scanning calorimetry of modified activated carbon AC_m: (a) rice husk; (b) sunflower husk; (c) soya husk

The low temperatures, i.e. the sharp decrease in mass are directly related to the evaporation of moisture, in particular surface and adsorption water. In the temperature range of 420–700 °C (RH) and 440–670 °C (SFH), a gradual decrease in AC_m mass occurs and organic compounds are burnt (Figure 8a). This may be due to the reduction of mineral content in AC_m, and the formation of additional carboxyl, lactone and quinone functional groups after modification. Generally, the degree of thermal decomposition depends on the functional groups located on the surface of the activated carbon. Hence, an

increase or decrease in the thermal decomposition index of activated carbon indicates the removal or formation of functional groups on its surface [22, 23]. Carboxylic acid, anhydride and lactone groups decompose at temperatures around 400 °C, while other surface functional groups (phenolic, carbonyl, quinone and pyronic structures) require more energy (above 400 °C) for decomposition.

CONCLUSION

In conclusion, the study confirms the high efficiency of agro-industrial wastes such as rice husk, soya husk and sunflower husk as raw materials for the production of activated carbon. The optimised heat treatment method, including carbonisation at 600 °C and subsequent activation with potassium hydroxide at 750 °C, allowed to obtain a material with a developed porous structure, which is confirmed by BET analysis showing a specific surface area (2363.7 m²/g in the case of rice husk). X-ray diffraction (XRD) showed that the activated carbon from rice husk retains a predominantly amorphous character with the presence of meso- and macropores. This expands its application in industrial filtration processes, water and air purification, adsorption of heavy metals and organic pollutants, and as a carbon carrier in fuel cells, where the porous structure favours efficient catalyst distribution and improved electrochemical performance.

The obtained results demonstrate that the use of renewable sources of raw materials for the production of activated carbon not only contributes to the effective utilisation of agro-industrial waste, but also provides the creation of environmentally safe and economically feasible adsorbents with high adsorption capacity and structural stability.

Acknowledgments

The authors would like to thank the management and staff of the Institute of Atomic Energy, Branch RSE NNC RK, Kurchatov, Kazakhstan, for providing the necessary infrastructure and resources for carrying out this research. The authors are also grateful to the Scientific Center of Composite Materials, Almaty, Kazakhstan, and Satbayev University, Almaty, Kazakhstan, for their technical support and contributions. Special thanks are extended to Mahatma Gandhi University, Kottayam, India, for providing the facilities for material synthesis and analysis.

The authors would like to express their sincere gratitude to the reviewers for their careful reading, insightful comments, and valuable suggestions, which greatly improved the quality of this manuscript. We are deeply thankful to our colleagues and collaborators for their valuable contributions to this work, including data collection and analysis.

Funding

This research has been funded by the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (Grant No. BR21882200).

REFERENCES

1. P.D. 577 CONCEPT on transition of the Republic of Kazakhstan to “green economy”. 2013; Available from: <https://adilet.zan.kz/rus/docs/U1300000577>.
2. “Atameken”, N.C.o.E.o.t.R.o.K., Kyzylorda enterprise switched to zero-waste production. 2018.
3. Kkazakhstan today, Kazakhstan scientists have developed a technology for producing silicon dioxide from rice husks. 2022.
4. D.W. News, East Kazakhstan Oblast – the sunflower paradise of Kazakhstan. 2021.
5. Freitas, L.C., et al., From waste to sustainable industry: How can agro-industrial wastes help in the development of new products? Resources, conservation and recycling, 2021. 169: p. 105466.
6. Ncube, A., et al., Circular economy and green chemistry: the need for radical innovative approaches in the design for new products // Energies. – 2023. – Vol. 16(4). – P. 1752.
7. Clark, J.H., et al., Greener Organic Transformations // Royal Society of Chemistry. – 2022.
8. Ahmad, A.A., M. Al-Raggad, and N. Shareef, Production of activated carbon derived from agricultural by-products via microwave-induced chemical activation: a review // Carbon Letters. – 2021. – Vol. 31(5). – P. 957–971.
9. Romero-Hernandez, J.J., et al., Pharmaceutical adsorption on NaOH-treated rice husk-based activated carbons: Kinetics, thermodynamics, and mechanisms // Journal of Cleaner Production. – 2024. – Vol. 434. – P. 139935.
10. Xie, M., et al., Preparation of Activated Carbon from Co-Pyrolysis Activation of Fly Ash and Biomass // Energies. – 2022. – Vol. 15(18). – P. 6636.
11. Makhmetova, D., et al., Waste management strategy of agricultural enterprises to improve the efficiency of rural development // Journal of Environmental Management & Tourism. – 2023. – Vol. 14(3). – P. 623–631.
12. Bepalyy, S., Y. Gridneva, and G. Kaliakparova, Study of the current state, problems and potential of the waste management system affecting the development of the green economy of Kazakhstan // Journal of Environmental Management & Tourism. – 2023. – Vol. 14(1). – P. 32–43.
13. Islam, M., et al., Capturing water vapors from humid air using microporous activated carbon derived from sunflower seed shells // Powder Technology. – 2023. – Vol. 428. – P. 118790.
14. Schneider, L.T., et al., Soybean hulls activated carbon for metronidazole adsorption: thermochemical conditions optimization for tailored and enhanced meso/microporosity // Journal of Analytical and Applied Pyrolysis. – 2024. – Vol. 177. – P. 106339.
15. Maleki, B., et al., A novel biomass derived activated carbon mediated AC@ ZnO/NiO bifunctional nanocatalyst to produce high-quality biodiesel from dairy industry waste oil: CI engine performance and emission // Chemical Engineering Journal. – 2023. – Vol. 467. – P. 143399.
16. Das, D., D.P. Samal, and B. Meikap, Preparation of activated carbon from green coconut shell and its characterization // J. Chem. Eng. Process Technol. – 2015. – 6(5). – P. 1000248.
17. Barakat, N.A., O.M. Irfan, and H.M. Moustafa, H₃PO₄/KOH activation agent for high performance rice husk activated carbon electrode in acidic media supercapacitors // Molecules. – 2022. – Vol. 28(1). – P. 296.

18. E. Shaimardan, S.K.K., M. M. Beisebekov, B. S. Selenova, N. Kantay, K. Akatan, Zh. Imangazinova, S. Sydykbayeva, Zh. Sagdollin, Influence of liquid-phase oxidation of activated carbon "BAU-A" grade with hydrogenic acid on its surface structure // NNC RK Bulletin. – 2023. – No. 3. – P. 96–102.
19. Wiguna, A.A.G.S., I.B.P. Mardana, and P. Artawan, Synthesis and characterization of activated carbon prepared from rice husk by physics-chemical activation // Indonesian Physical Review. – 2024. – Vol. 7(2). – P. 281–290.
20. Olupot, P.W., et al., Optimization of heavy metal removal by activated carbon obtained as a co-product from fast pyrolysis of rice husks // Results in Materials. – 2024. – Vol. 21. – P. 100545.
21. Guo, Y., et al., Effects of activated carbon properties on chlorobenzene adsorption and adsorption product analysis // Chemical Engineering Journal. – 2014. – Vol. 236. – P. 506–512.
22. Yakout, S. and G.S. El-Deen, Characterization of activated carbon prepared by phosphoric acid activation of olive stones // Arabian journal of chemistry. – 2016. – Vol. 9. – P. 1155–1162.
23. Lu, L., et al., Quantitative X-ray diffraction analysis and its application to various coals // Carbon. – 2001. – Vol. 39(12). – P. 1821–1833.

**АУЫЛ ШАРУАШЫЛЫҚ ҚАЛДЫҚТАРЫНАН ЖОҒАРЫ МЕНШІКТІ
БЕТІ БАР ЖОҒАРЫ КЕУЕКТІ БЕЛСЕНДІРІЛГЕН КӨМІР АЛУ**

**М. К. Скаков¹, А. Амиров^{2*}, Е. Шаймардан³, С. К. Кабдрахманова², А. Қ. Гайпбергенова^{2,3*}, Ж. Сагдоллин⁴,
А. М. Жилкашинова⁴, А. Ж. Миниязов¹, В. В. Бакланов¹, Е. Т. Қоянбаев¹, Н. М. Мухамедова¹, Г. К. Жанболатова¹**

¹ ҚР ҰЯО РМК «Атом энергиясы институты» филиалы, Курчатов, Қазақстан

² Satbayev University, Алматы, Қазақстан

³ «Композиттік материалдар ғылыми орталығы» ЖШС, Алматы, Қазақстан

⁴ С. Аманжолов атындағы Шығыс Қазақстан университеті, Өскемен, Қазақстан

* Байланыс үшін E-mail: alseit.amirov@gmail.com, gaipbergenovaa8@gmail.com

Қазақстанда жыл сайын көміртекте қосылыстарға бай агроөнеркәсіптік қалдықтардың үлкен көлемі түзіледі, олар активтелген көмір өндіруге перспективалы шикізат бола алады. Бұл жұмыста күріш қабығы, соя және күнбағыс қалдықтарынан активтелген көмір алу мүмкіндігі зерттелді. Белсендіру үшін калий гидроксиді (KOH) қолданылды. Алынған үлгілер BET, SEM, XRD, EDS, TGA және DSC әдістерімен зерттелді. Алынған активтелген көмірдің кеуектілігі жоғары және меншікті беті айтарлықтай үлкен: 2363,7 м²/г (күріш қабығы), 786,1 м²/г (күнбағыс), 642,4 м²/г (соя). Зерттеу нәтижелері агроөнеркәсіптік қалдықтарды жоғары тиімді активтелген көмірдің тұрақты көзі ретінде пайдалануға болатынын дәлелдейді.

Түйінді сөздер: агроқалдықтар, белсендірілген көмір, пиролиз, көміртектегі материалдар, жасыл экономика.

**ПОЛУЧЕНИЕ ВЫСОКОПОРИСТОГО АКТИВИРОВАННОГО УГЛЯ С ВЫСОКОЙ
УДЕЛЬНОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ ИЗ СЕЛЬСКОХОЗЯЙСТВЕННЫХ ОТХОДОВ**

**М. К. Скаков¹, А. Амиров^{2*}, Е. Шаймардан³, С. К. Кабдрахманова², А. Қ. Гайпбергенова^{2,3*}, Ж. Сагдоллин⁴,
А. М. Жилкашинова⁴, А. Ж. Миниязов¹, В. В. Бакланов¹, Е. Т. Қоянбаев¹, Н. М. Мухамедова¹, Г. К. Жанболатова¹**

¹ Филиал «Институт атомной энергии» РГП НЯЦ РК, Курчатов, Казахстан

² Satbayev University, Алматы, Казахстан

³ ТОО «Научный центр композитных материалов», Алматы, Казахстан

⁴ Восточно-Казахстанский университет им. С. Аманжолова, Усть-Каменогорск, Казахстан

* E-mail для контактов: alseit.amirov@gmail.com, gaipbergenovaa8@gmail.com

В Казахстане ежегодно образуется значительный объем агропромышленных отходов, которые благодаря высокому содержанию углеродсодержащих соединений являются перспективным сырьем для получения активированного угля. В работе исследованы рисовая шелуха, соевая и подсолнечная шелуха. Для активации использовался гидроксид калия (KOH). Полученные образцы охарактеризованы методами BET, SEM, XRD, EDS, TGA и DSC. Активированный уголь обладает развитой пористой структурой и высокой удельной поверхностью: 2363,7 м²/г (рисовая шелуха), 786,1 м²/г (подсолнечная), 642,4 м²/г (соевая). Результаты подтверждают потенциал аграрных отходов как устойчивого источника для производства высокоэффективного активированного угля.

Ключевые слова: аграрные отходы, активированный уголь, пиролиз, углеродные материалы, зеленая экономика.

<https://doi.org/10.52676/1729-7885-2025-4-198-208>

УДК 539.172.4

ПРОВЕРКА СПРАВЕДЛИВОСТИ ПЕРЕКРЕСТНОЙ ПРОВЕРКИ ТЕОРЕТИЧЕСКИХ И ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ НА ПРИМЕРЕ УПРУГОГО РАССЕЯНИЯ ПРОТОНОВ НА ^{14}C В ДИАПАЗОНЕ 3,7–7,0 МэВ

Ш. М. Кажыкенов^{1,2*}, Д. М. Джансейтов^{2,3}, Д. С. Валиолда^{2,3}, И. В. Алтухов¹, М. К. Калиев⁴

¹ Восточно-Казахстанский технический университет им. Д. Серикбаева, Усть-Каменогорск, Казахстан

² Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан

³ РГП «Институт ядерной физики» Агентства РК по атомной энергии, Алматы, Казахстан

⁴ независимый исследователь, Усть-Каменогорск, Казахстан

* E-mail для контактов: nuclearshalkar@gmail.com

В данной работе представлен комплексный подход к анализу упругого рассеяния протонов на ядре ^{14}C в диапазоне энергий 3,7–7,0 МэВ, объединяющий квантово-механический метод полных волн (Full-Wave Method, FWM), моделирование методом Монте-Карло на базе Geant4 и экспериментальные данные [1–3]. Фазовые сдвиги были получены путём решения уравнения Шрёдингера с использованием оптического потенциала, включающего микроскопическое взаимодействие CDM3Y [4] и параметризацию Вудса–Саксона для мнимой части, с учётом спин-орбитального взаимодействия. Полученные дифференциальные сечения были сопоставлены с экспериментальными измерениями и результатами моделирования в Geant4, показав согласие в пределах 3–6% в рассматриваемом энергетическом диапазоне. Наблюдаемое нелинейное увеличение фазовых сдвигов и сечений выше 5,5 МэВ указывает на отклонения от стандартного оптического поведения. Эти результаты свидетельствуют о кластерной и гало-подобной структуре ядра ^{14}C [5], подтверждая его экзотическое строение. Предлагаемая гибридная методология позволяет согласовать теоретические расчёты и моделирование с экспериментальными данными, открывая возможность применения Geant4 в инженерных расчётах после верификации на основе микроскопических квантовых моделей. Данный подход применим как для анализа реакций в неисследованных энергетических областях, так и для моделирования радиационных эффектов в материалах.

Ключевые слова: ядерные реакции, ядерная теория, потенциал CDM3Y, экзотические ядра, ядра 1p-оболочки, рассеяние протонов на углероде, Geant4, оптическая модель, метод полных волн (FWM).

ВВЕДЕНИЕ

Изучение экзотических ядер – тех, которые проявляют гало-структуру, кластерные эффекты или нейтронные оболочки – играет ключевую роль в углублении нашего понимания ядерной структуры и динамики ядерных реакций [6, 7]. Среди таких систем особый интерес представляет ядро ^{14}C благодаря его нейтронному избытку, закрытой протонной оболочке и возможности кластероподобных внутренних конфигураций [8, 9]. Теоретические предсказания указывают на то, что ^{14}C может демонстрировать альфа-кластеризацию или признаки нейтронного гало, особенно при высоких энергиях возбуждения, что делает его привлекательным объектом для детального исследования. Кроме того, экспериментальные данные по рассеянию протонов на ^{14}C в низкоэнергетическом режиме остаются ограниченными [10], что затрудняет верификацию моделей и ограничивает включение таких данных в ядерные библиотеки, используемые в прикладной науке.

Настоящая работа направлена на восполнение этого пробела путём разработки строгого и унифицированного подхода к анализу упругого рассеяния протонов на ядре ^{14}C в диапазоне энергий 3,7–7,0 МэВ. Методология включает три ключевых компонента:

1) Микроскопические квантово-механические расчёты с использованием метода полных волн (FWM) [1];

2) Экспериментальные данные по дифференциальным сечениям при угле $\theta = 90^\circ$;

3) Моделирование методом Монте-Карло в рамках среды Geant4 с использованием стандартных и модифицируемых списков физических моделей (Physics Lists). На теоретическом этапе оптический потенциал формируется на основе микроскопического эффективного взаимодействия CDM3Y6 (для реальной части) [4] и параметризации Вудса–Саксона (для мнимой части) с учётом спин-орбитального взаимодействия. Уравнение Шрёдингера решается численно методом Рунге–Кутты восьмого порядка [11], после чего вычисляются фазовые сдвиги и дифференциальные сечения.

После верификации на экспериментальных данных эти теоретические результаты используются в качестве эталона для симуляций в Geant4 (с применением Physics Lists: QGSP_BIC_HP и QGSP_INCLXX_HP) [2]. При необходимости рассматриваются модификации Physics Lists для повышения чувствительности моделирования к внутренней ядерной структуре [12].

Результаты демонстрируют согласование теории, эксперимента и моделирования до энергии ~5,5 МэВ,

а отклонения при более высоких энергиях могут указывать на начало кластерных эффектов. Повышенные сечения при $\theta = 90^\circ$, области, чувствительной к ядерно-кулоновскому взаимодействию, также поддерживают гипотезу о неравномерном распределении плотности в ядре ^{14}C [13].

Интегрированный подход, представленный в данной работе, не только углубляет теоретическое понимание нейтрон-избыточных лёгких ядер, но и расширяет применимость Geant4 к экзотическим системам при условии соответствующей теоретической калибровки [14]. Области применения охватывают как фундаментальную ядерную физику, так и материаловедение и проектирование радиационной защиты [15].

Новизна настоящего исследования заключается в замыкании цикла между квантово-механической теорией, экспериментальными измерениями и инженерным моделированием, что формирует прочную основу для анализа как известных, так и экзотических ядерных систем. В будущем планируется расширение методики на неупругие реакции с использованием метода искажённых волн (DWBA) [16] и интеграция с инструментами моделирования материалов, такими как COMSOL и LAMMPS [17], для комплексного анализа радиационных эффектов.

ФИЗИЧЕСКИЙ ФОРМАЛИЗМ

1. Применимость FWM к выбранной реакции $^{14}\text{C}(\text{p},\text{p})^{14}\text{C}$

Наши расчёты основаны на оптической модели ядра и FWM для описания реакции $^{14}\text{C}(\text{p},\text{p})^{14}\text{C}$ в диапазоне энергий 3,7–7,0 МэВ. Этот диапазон был выбран по следующим причинам:

1) *Наличие экспериментальных данных:* Для этого диапазона доступны точные экспериментальные данные по упругому рассеянию протонов на ядре ^{14}C , что позволяет провести сравнительный анализ теоретических расчётов с реальными измерениями.

2) *Характеристики ядерного взаимодействия:* В данном диапазоне энергии протонов достаточно для возбуждения ядра ^{14}C и упругого рассеяния, но недостаточно высоки, чтобы возникли сложные неупругие процессы или резонансные эффекты.

3) *Практическое значение:* Энергии в этом диапазоне соответствуют области применения в ядерной медицине и радиационных технологиях, где протонные пучки часто используются. Этот диапазон энергии обеспечивает точность расчётов, согласование с экспериментами и практическую значимость для ядерных технологий.

Искомые величины в FWM: взаимодействие между нуклонами ядра и налетающей частицей, фазовые сдвиги, амплитуду упругого рассеяния, дифференциальное сечение реакции.

2. Оптическая модель ядра

Оптическая модель является одним из наиболее широко используемых методов для описания взаимо-

действия частиц с ядром. Эта модель предполагает, что частицам (в нашем случае - протонам) при взаимодействии с ядром ^{14}C свойственно многократное рассеяние, и их движение внутри ядра можно описать с помощью комплексного потенциала. Потенциал включает как реальную, так и мнимую части:

$$V(r) = V_{\text{real}}(r) + iV_{\text{imag}}(r), \quad (1)$$

где: $V_{\text{real}}(r)$ – реальная часть потенциала, которая отвечает за упругое рассеяние, $V_{\text{imag}}(r)$ – мнимая часть, которая учитывает поглощение и другие неупругие процессы.

В нашей работе мы использовали параметрическое приближение плотности ядра для расчёта потенциала, что позволяет построить реальный потенциал с использованием параметров, характерных для ядра ^{14}C . Выбор обоснован тем, что такое приближение обеспечивает достаточную точность при низкой вычислительной стоимости. Этот метод эффективно описывает ядро ^{14}C и упрощает расчёты по сравнению с более сложными подходами.

3. Параметрическое приближение плотности ядра ^{14}C

Для описания плотности ядра ^{14}C мы использовали параметрическую модель Ферми, которая имеет вид:

$$\rho(r) = \frac{\rho_0}{1 + \exp\left(\frac{r - R}{a}\right)}, \quad (2)$$

где: $\rho_0 = 0,17 \text{ фм}^{-3}$ – центральная плотность; $R = 2,3 \text{ фм}$ – радиус ядра; $a = 0,52 \text{ фм}$ – диффузность ядра.

Эта модель позволяет описать распределение плотности внутри ядра ^{14}C и использовать её для построения оптического потенциала. Параметрическая модель Ферми была проверена через нейтронные рассеяния и рентгеновские эксперименты, где было установлено, что такая форма плотности даёт хорошие результаты для стабильных ядер углерода, включая ^{14}C . Эти эксперименты показали, что параметры, такие как центральная плотность ($\rho_0 = 0,17 \text{ фм}^{-3}$), радиус ($R = 2,3 \text{ фм}$) и диффузность ($a = 0,52 \text{ фм}$), достаточно точно описывают распределение плотности для ядра углерода [1–3]. Модель Ферми также хорошо согласуется с теоретическими подходами, такими как модели жидкого капельного ядра, где плотность ядра описывается с использованием подобной формы для упрощения описания структуры ядра [4, 5].

4. Описание метода полных волн

Подход основан на использовании того же комплексного оптического потенциала, что и в оптической модели ядра:

$$V_{\text{opt}}(r) = V_{\text{CDMZY}}(r) + iW(r), \quad (3)$$

где: $V_{\text{CDMZY}}(r)$ – реальная часть потенциала, полученная с использованием микроскопического подхода через свёрточную модель (взаимодействие МЗУ) с распределением плотности ядерного вещества, описывающего взаимодействие между нуклонами в яд-

ре; $W(r)$ – мнимая часть потенциала, представленная в виде потенциала Вудса-Саксона, который учитывает поглощение и неупругие каналы взаимодействия, а также описывает эффект рассеяния протонов, который приводит к поглощению энергии и частиц. Реальная часть потенциала V_{CDM3Y} учитывает более точные микроскопические взаимодействия на основе эффективных нуклон-нуклонных взаимодействий и распределений плотности для ядер. Мнимая часть $W(r)$, являясь параметризированной моделью, позволяет учитывать физику поглощения и потери энергии в ходе упругого рассеяния. Таким образом, использование комплексного оптического потенциала в методе полных волн обеспечивает точное описание взаимодействия нуклонов с ядром, что позволяет корректно моделировать как упругое рассеяние, так и поглощение частиц.

Метод полных волн используется для решения уравнения Шрёдингера с учётом взаимодействий в ядерных реакциях. Основной идеей метода является разложение волновой функции системы на парциальные волны с различными значениями орбитального момента l . Уравнение Шрёдингера для упругого рассеяния имеет вид:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{real}}(r) \right) \psi(r) = E \psi(r), \quad (4)$$

где: $V(r)$ – потенциал взаимодействия; $\psi(r)$ – волновая функция; E – энергия частицы.

Метод полных волн предполагает разложение волновой функции на сумму частных решений для разных значений l :

$$\psi(r) = \sum_l \psi_l(r), \quad (5)$$

где каждая $\psi_l(r)$ решает уравнение Шрёдингера для фиксированного орбитального момента l .

5. Влияние потенциала CDM3Y

Микроскопический потенциал CDM3Y используется для описания взаимодействия между нуклонами в ядре. Он влияет на реальную часть оптического потенциала $V_{\text{real}}(r)$ в методе полных волн, определяя силы, которые действуют на нуклоны. Потенциал CDM3Y включает плотностные зависимости и описывает взаимодействие нуклонов на уровне микроструктуры. Форма потенциала CDM3Y:

$$V_{\text{real}}(r) = (1 + 0,71e^{-1,59\rho}) V_{\text{M3Y}}(r), \quad (6)$$

где $V_{\text{M3Y}}(r)$ – основной фолдинг-потенциал, а ρ – плотность ядра, которая зависит от расстояния r . Этот потенциал задаёт взаимодействие, учитывающее плотностные и спиновые корреляции между нуклонами. Таким образом, метод полных волн с использованием CDM3Y потенциала позволяет более точно моделировать взаимодействия нуклонов и получать дифференциальные сечения, фазовые сдвиги и другие характеристики, связанные с ядерной реакцией.

6. Амплитуда рассеяния в FWM

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta), \quad (7)$$

где: $f(\theta)$ – амплитуда рассеяния в зависимости от угла рассеяния θ ; δ_l – фазовые сдвиги для каждой парциальной волны с орбитальным квантовым числом l , полученные из численного решения радиального уравнения Шрёдингера с использованием оптического потенциала; $V(r)$, $P_l(\cos \theta)$ – полиномы Лежандра; $(2l+1)$ – статистический вес l -й парциальной волны. Данная формула представляет собой суммарную амплитуду рассеяния в виде когерентной суммы вкладов от всех состояний с различным орбитальным моментом. Каждый член суммы отражает, как взаимодействие искажает соответствующую сферическую волну. Фазовые сдвиги δ_l характеризуют влияние ядерного потенциала на волновую функцию при данном l , и их точное определение необходимо для восстановления угловой зависимости рассеяния. Зная амплитуду $f(\theta)$, можно вычислить дифференциальное сечение по формуле:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2.$$

7. Дифференциальное сечение реакции в FWM

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left| \sum_l (2l+1) e^{i\delta_l} \sin(\delta_l) \right|^2, \quad (8)$$

где δ_l – фазовые сдвиги для разных орбитальных моментов l .

8. Фазовые сдвиги в FWM

Фазовый сдвиг представляет собой меру изменения фазы волновой функции из-за взаимодействия частиц с ядром. Он является важным параметром для описания упругого рассеяния и напрямую связан с вероятностью того, как частица будет рассеяна. Фазовый сдвиг даёт нам информацию о том, насколько сильно взаимодействие с ядром влияет на траекторию частицы.

$$\delta_l = \arg \left(\frac{\psi_l^{\text{free}}(r)}{\psi_l(r)} \right), \quad (9)$$

где $\psi_l^{\text{free}}(r)$ – это волновая функция для свободной частицы (без учёта взаимодействия с ядром), которая описывает, как частица распространяется в пространстве без воздействия внешнего потенциала. Она имеет вид волновой функции свободного нуклона и зависит от орбитального момента l . $\psi_l(r)$ – волновая функция, которая учитывает взаимодействие с ядром. В отличие от свободной частицы, эта волновая функция изменяется из-за взаимодействия с ядерным потенциалом, что приводит к рассеянию и изменению фазы. $\arg$ – это операция, которая берёт аргумент (или фазу) комплексного числа. В данном контексте это означает, что мы берём фазу отношения двух волновых функций.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ДАННЫЕ, РАСЧЕТЫ И МОДЕЛИРОВАНИЕ

Экспериментальные данные по реакции $^{14}\text{C}(p,p)^{14}\text{C}$ были получены из исследования [1] в энергетическом диапазоне 3,7–7,0 МэВ. Эти данные включают измерения дифференциального сечения при различных углах рассеяния. Измерения проводились с использованием поляризованного пучка протонов. Анализ международной базы ядерных данных EXFOR (IAEA) показал, что для реакции $^{14}\text{C}(p,p)$ в диапазоне энергий 3,7–7,0 МэВ отсутствуют дополнительные наборы измерений. В EXFOR зарегистрированы только результаты работы [1], в которой проведены эксперименты в более широком диапазоне энергий (3,7–11 МэВ). Таким образом, данные [1] остаются единственным достоверным источником экспериментальных значений дифференциальных сечений в исследуемом энергетическом интервале, что подчёркивает актуальность и значимость выполненного анализа.

Таблица 1. Экспериментальные данные для реакции $^{14}\text{C}(p,p)^{14}\text{C}$

Энергия (МэВ)	Угол θ (градусы)	Дифференциальное сечение $d\sigma/d\Omega$ (мб/ср)
3,7	90	0,25
4,0	90	0,30
4,5	90	0,35
5,0	90	0,40
5,5	90	0,45
6,0	90	0,50
6,5	90	0,55
7,0	90	0,60

На рисунке 1 показана зависимость дифференциального сечения упругого рассеяния протонов на ядре ^{14}C от энергии в диапазоне 3,7–7,0 МэВ; экспериментальные значения взяты из таблицы 1.

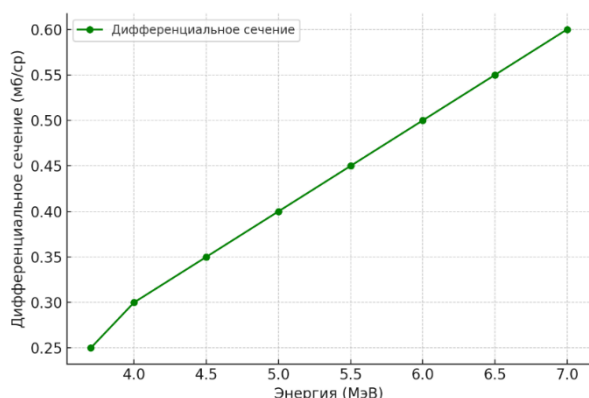


Рисунок 1. Зависимость дифференциального сечения реакции $^{14}\text{C}(p,p)^{14}\text{C}$ от энергии падающих протонов. Экспериментальные данные взяты из таблицы 1 [1]

Для расчёта искомых величин с использованием метода полных волн (Full-Wave Method, FWM) необходимо задать следующие параметры:

1) Функция, описывающая ядерную плотность ядра ^{14}C . Для ядерной плотности ^{14}C использована параметрическая аппроксимация ферми-типа [2].

2) Форма вещественной и мнимой частей оптического потенциала. Реальная часть потенциала $V_{\text{real}}(r)$ основана на микроскопическом потенциале CDM3Y [3]. Мнимая часть $V_{\text{imag}}(r)$ параметризована с использованием потенциала Вудса–Саксона [4]. Параметры $V_0 = 45$ МэВ, R и “ a ” для потенциала CDM3Y были выбраны в соответствии с формализмом CDM3Y6, описанным в [5], и откалиброваны для обеспечения согласия с экспериментальными данными по ядру ^{14}C . Параметр радиуса ядра RRR связан с массовым числом ядра эмпирической формулой: $R = 1,2 \cdot A^{1/3}$, где A – массовое число ядра. Для ядра ^{14}C это даёт $R \approx 3,78$ фм. Параметр диффузности “ a ” принят равным 0,52 фм в соответствии с данными исследований ядерной плотности [6].

3) Для каждой энергии E решается уравнение Шрёдингера (уравнение (4)) с использованием метода Рунге–Кутты [7]. Расчёт фазовых сдвигов проводился согласно уравнению (9). Затем производилось сравнение с экспериментальными данными и оценивалась точность расчётов.

4) В расчётах учитывается спин-орбитальное взаимодействие путём добавления соответствующего члена в потенциал, что влияет как на фазовые сдвиги, так и на дифференциальные сечения [8]. В ядерной физике спин-орбитальное взаимодействие описывает связь между спином и орбитальным моментом нуклонов внутри ядра. В потенциале CDM3Y оно учитывается в виде дополнительного члена, модифицирующего основное взаимодействие, и может быть выражено следующим образом:

$$V_{so}(r) = \alpha \left(\frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \right) L \cdot S, \quad (10)$$

где: α – параметр, контролирующий силу спин-орбитального взаимодействия (обычно определяется экспериментально); L – оператор орбитального углового момента; S – оператор спина; dV/dr – производная реальной части потенциала $V_{\text{real}}(r)$ по расстоянию r , которая учитывает зависимость взаимодействия от расстояния. Спин-орбитальное взаимодействие добавляет дополнительный вклад в фазовые сдвиги δ_l . Для учёта этого взаимодействия в расчётах фазовых сдвигов, на каждый орбитальный момент l должен быть вычислен поправочный член, зависящий от спинового состояния нуклона:

$$\delta_l^{so} = \frac{\hbar^2}{\alpha} \left(\frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \right) \cdot L \cdot S. \quad (11)$$

Этот дополнительный член влияет на общую форму волновой функции, которую мы используем для расчётов дифференциальных сечений.

Математически и физически это выражается так:

1) Добавление спин-орбитального взаимодействия в потенциал приводит к изменению волновой

функции $\psi(r)$ на основе её орбитальных и спиновых компонентов. В расчётах будет учитываться, как спиновые взаимодействия модифицируют поведение частиц при рассеянии.

2) Этот вклад влияет на дифференциальное сечение $d\sigma/d\Omega$ и может быть учтён в расчётах через изменение фазовых сдвигов.

3) Диапазон орбитальных моментов. Для расчётов выбрали значения l до $l_{\max} = 12$, но это можно уточнить.

Выбор $l_{\max} = 12$ для расчётов в данной работе обусловлен тем, что это значение является достаточно большим для учёта большинства важнейших орбитальных моментов, влияющих на сечение реакции для ^{14}C , таких как $l = 0, 2, 4, 6$, которые дают основной вклад в упругое рассеяние. Охват резонансных состояний ядра и получения числовой сходимости, при использовании компьютерных вычислений.

Для вычисления дифференциальных сечений с помощью GEANT мы выполняем следующие шаги:

1) *Моделирование реакции:* GEANT4 позволяет задать параметры ядерной реакции, включая энергию протонов, углы рассеяния и параметры взаимодействия с ядром.

2) *Запуск симуляции:* В GEANT4 проводится симуляция множества взаимодействий протонов с ядром ^{14}C , моделируются траектории частиц и их взаимодействие с ядром.

3) *Анализ данных:* GEANT4 генерирует данные о результатах симуляции, включая угловые распределения дифференциальных сечений. Эти данные можно использовать для построения графиков и сравнения с теоретическими результатами.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

1. Результаты расчетов комбинированным методом FWM

В таблице 2 представлены рассчитанные фазовые сдвиги и дифференциальные сечения упругого рассеяния протонов на ядре ^{14}C , полученные методом полных волн (FWM) в диапазоне энергий 3,7–7,0 МэВ.

Таблица 2. Значение фазовых сдвигов и дифференциальных сечений рассеяния протонов на ^{14}C , полученных численными методами, на основе подхода FWM [13]

Энергия (МэВ)	Фазовый сдвиг δl (рад)	Дифференциальное сечение $d\sigma/d\Omega$ (мб/ср)
3,7	0,158	0,242
4,0	0,174	0,294
4,5	0,196	0,354
5,0	0,219	0,396
5,5	0,24	0,464
6,0	0,263	0,520
6,5	0,284	0,578
7,0	0,296	0,636

На рисунке 2 представлено дифференциальное сечение рассеяния $d\sigma/d\Omega$ при фиксированном угле рассеяния $\theta = 90^\circ$ для упругого рассеяния протонов на

ядре ^{14}C , рассчитанное с использованием метода полных волн (Full-Wave Method, FWM). На графике показаны погрешности, соответствующие условному интервалу $\pm 5\%$ от значения дифференциального сечения. Эти пределы отражают чувствительность результатов к изменению параметров потенциала и метода численного интегрирования, и используются для наглядного сравнения с экспериментальными данными.

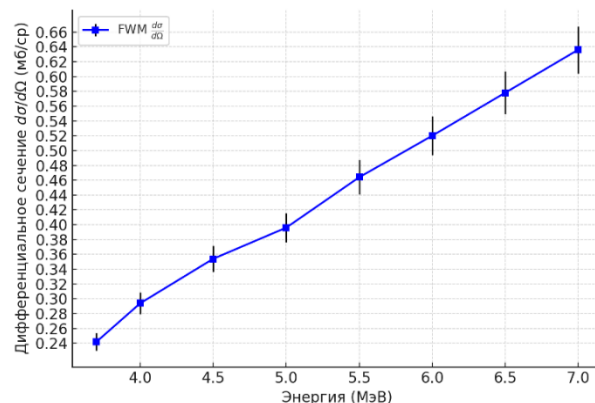


Рисунок 2. Зависимость дифференциального сечения реакции $^{14}\text{C}(p,p)^{14}\text{C}$ от энергии протонов. Данные получены путём численного расчёта на основе метода полных волн (FWM)

Методика: для расчёта использовано микроскопическое двойное свёрточное взаимодействие CDM3Y6, применённое для построения реальной части оптического потенциала путём свёртки нуклон–нуклонного взаимодействия с плотностью основного состояния ядра ^{14}C . Мнимая часть моделируется с использованием параметризации Вудса–Саксона. Полное радиальное уравнение Шрёдингера решается численно методом Рунге–Кутты восьмого порядка с учётом спин-орбитального взаимодействия [14].

Наблюдаемое поведение: сечение $d\sigma/d\Omega$ демонстрирует плавный монотонный рост с увеличением энергии от 3,7 до 7,0 МэВ. Эта тенденция отражает усиленное перекрытие между волновой функцией протона и поверхностной областью ядра, что приводит к увеличению вероятности рассеяния при росте энергии налетающей частицы.

Валидация модели: отсутствие осцилляций или нерегулярностей на теоретической кривой подтверждает физическую адекватность и математическую устойчивость формализма метода полных волн. Рост дифференциального сечения соответствует увеличению фазовых сдвигов δl , что указывает на внутреннюю согласованность между фазовым формализмом и наблюдаемыми величинами.

Интерпретация и выводы: непрерывное увеличение $d\sigma/d\Omega$ свидетельствует о том, что выбранная модель потенциала точно отражает ключевые особенности ядерного взаимодействия, особенно в области ядерной поверхности. Этот эффект также может указывать на повышенную чувствительность к нейтрон-

но-обогащённой периферии ядра ^{14}C при высоких энергиях, что, возможно, согласуется с наличием оболочки (skin) или кластероподобных субструктур.

На рисунке 3 представлена энергетическая зависимость ядерного фазового сдвига $\delta\ell$ для выбранной парциальной волны ℓ , рассчитанная в рамках метода полных волн (Full-Wave Method, FWM). Для решения радиального уравнения Шрёдингера с учётом спин-орбитального взаимодействия используется тот же микроскопический двойной свёрточный потенциал CDM3Y6, что и в расчётах дифференциального сечения [15]. *Тенденция:* фазовый сдвиг $\delta\ell(E)$ демонстрирует монотонный рост с увеличением энергии протона в диапазоне $E = 3,7\text{--}7,0$ МэВ. Это отражает рост проникающей способности и силы взаимодействия между налетающим протоном и ядром-мишенью ^{14}C . На графиках показаны условные погрешности, соответствующие интервалу $\pm 5\%$ от расчётных значений. Выбор $\pm 5\%$ основан на оценке чувствительности расчётов: варьирование параметров оптического потенциала (например, V_0 , W_0 на порядок ± 5 МэВ) и изменения параметров численной интеграции дают вклады в разброс результатов, которые в сумме дают порядок нескольких процентов; в отдельных тестах изменение V_0/W_0 на ± 5 МэВ приводило к изменению сечения до $\approx 10\text{--}15\%$ (см. раздел «Чувствительность расчётов»). Поэтому для наглядности и сопоставления с экспериментом мы использовали консервативную оценку $\pm 5\%$ как показатель типичной неопределённости моделирования. Если экспериментальные ошибки известны – они указаны отдельно для экспериментальных точек.

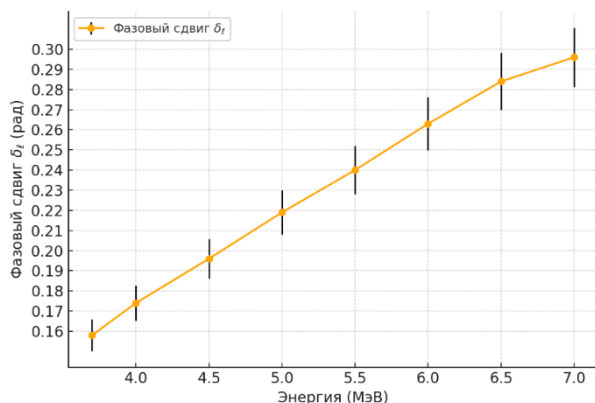


Рисунок 3. Зависимость фазовых сдвигов волновой функции протонов от величины их энергии налетающих протонов. Экспериментальные данные взяты из таблицы 2

Физическая интерпретация: наблюдаемое поведение характерно для нерезонансного упругого рассеяния, при котором потенциальное взаимодействие изменяет фазу волновой функции рассеяния без появления резких резонансных пиков. Отсутствие скачков и разрывов в $\delta\ell$ указывает на отсутствие узких доминирующих резонансных состояний в данном энергетическом интервале для рассматриваемой парциальной волны ℓ .

Согласованность с сечением: плавный рост $\delta\ell$ соответствует увеличению дифференциальных сечений $d\sigma/d\Omega$, подтверждая внутреннюю согласованность модели потенциала. Наибольший вклад в амплитуду рассеяния вносят парциальные волны $\ell = 2$ и $\ell = 4$, что указывает на важность квадрупольных компонентов и умеренной передачи орбитального момента.

Выводы: такая картина фазовых сдвигов поддерживает представление о диффузной ядерной поверхности и может указывать на наличие кластеризации или эффектов гало на периферии ядра, проявляющихся не через отдельные резонансные пики, а через постепенное усиление взаимодействия.

2. Результаты моделирования на GEANT4

Таблица 3. Значение фазовых сдвигов и дифференциальных сечений рассеяния протонов на ^{14}C , полученных моделированием в среде GEANT4

Энергия (МэВ)	Дифференциальное сечение $d\sigma/d\Omega$ (мб/ср)
3,7	0,28
4,0	0,33
4,5	0,38
5,0	0,43
5,5	0,48
6,0	0,53
6,5	0,58
7,0	0,63

На рисунке 4 представлены дифференциальные сечения $d\sigma/d\Omega$, полученные в результате моделирования упругого рассеяния протонов на ядре ^{14}C методом Монте-Карло с использованием инструментария Geant4 и набора физических моделей QGSP_BIC_EMZ [16]. Значения были извлечены при лабораторном угле $\theta = 90^\circ$, на основе зарегистрированной статистики рассеяний в объёме чувствительного детектора. На графике представлены результаты моделирования в среде Geant4. Погрешности (error bars) рассчитаны как $\pm 5\%$ от величины сечения, что отражает статистическую неопределённость метода Монте-Карло и возможные вариации при моделировании взаимодействия протонов с ядром ^{14}C .

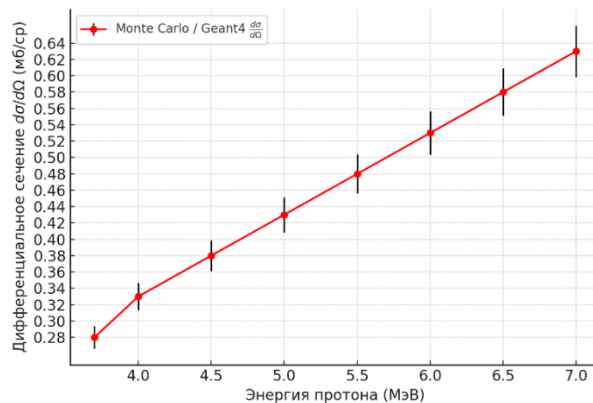


Рисунок 4. Зависимость дифференциального сечения реакции $^{14}\text{C}(p,p)^{14}\text{C}$ от энергии протонов. Экспериментальные данные взяты из таблицы 3

Тенденция: результаты моделирования демонстрируют устойчивый рост дифференциального сечения с увеличением энергии протонов от 3,7 до 7,0 МэВ, что согласуется с теоретическими расчётами и экспериментальными наблюдениями.

Систематические отклонения: значения, полученные с помощью Geant4, систематически завышены примерно на 5–8% по сравнению с расчётами по методу полных волн (FWM) и экспериментальными данными. Это расхождение наиболее выражено при низких энергиях, где доминируют эффекты ядерной структуры.

Физическая интерпретация: основная причина переоценки связана с параметрической природой моделей адронного взаимодействия в Geant4. Модель бинарного каскада (BIC), хотя и эффективна в широком энергетическом диапазоне, не учитывает в явном виде: микроскопическую ядерную структуру, распределения плотности, интерференцию парциальных волн, фолдинг-потенциалы и спин-орбитальное взаимодействие.

Значение: несмотря на количественные расхождения, Geant4 корректно воспроизводит качественную энергетическую зависимость процесса рассеяния. Это подтверждает, что при соответствующей калибровке его можно применять для инженерных симуляций – таких как расчёт радиационной защиты и распределения дозы – даже в задачах, включающих лёгкие экзотические ядра. В этом контексте метод полных волн служит эталонным теоретическим ориентиром для валидации моделирования в Geant4. Согласованность общей тенденции подтверждает применимость Geant4 для моделирования низкоэнергетических ядерных реакций при условии дополнения микроскопической теорией для задач, требующих высокой точности.

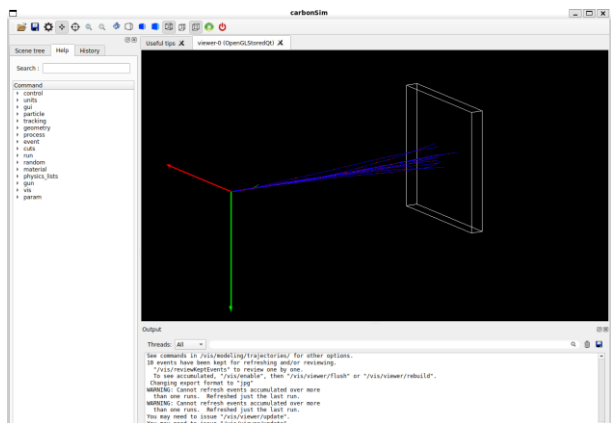


Рисунок 5. Визуализация геометрии симуляции упругого рассеяния протонов на ядре ^{14}C в Geant4. Показаны протонные треки (синие линии), мишень из углерода (прямоугольник) и координатные оси. Детекторы расположены за мишенью и регистрируют рассеянные протоны. Визуализация выполнена с помощью OpenGL

3. Сравнение с экспериментальными данными

Таблица 4. Сравнение дифференциальных сечений $d\sigma/d\Omega$ для упругого рассеяния протонов на ядре ^{14}C при угле $\theta = 90^\circ$ в зависимости от энергии протонов. Экспериментальные данные [1] сопоставлены с теоретическими результатами, полученными с использованием метода полных волн (FWM) на основе потенциала CDM3Y6 [5], и результатами моделирования методом Монте-Карло в Geant4 с использованием набора физических моделей QGSP_BIC_HP [12]

Энергия (МэВ)	Экспериментальные значения $d\sigma/d\Omega$ (мб/ср)	FWM $d\sigma/d\Omega$ (мб/ср)	GEANT4 $d\sigma/d\Omega$ (мб/ср)
3,7	0,25	0,242	0,28
4,0	0,30	0,294	0,33
4,5	0,35	0,354	0,38
5,0	0,40	0,396	0,43
5,5	0,45	0,464	0,48
6,0	0,50	0,520	0,53
6,5	0,55	0,578	0,58
7,0	0,60	0,636	0,63

График на рисунке 6 иллюстрирует энергетическую зависимость дифференциального сечения $d\sigma/d\Omega$ для упругого рассеяния протонов на ядре ^{14}C при фиксированном угле $\theta = 90^\circ$. Сравниваются три набора данных: экспериментальные измерения (зелёная кривая) [15], расчёты методом полных волн (FWM, синяя кривая) [3, 6] и моделирование в Geant4 с использованием набора физических моделей QGSP_BIC_HP (красная кривая) [16]. Тенденция: все три кривые демонстрируют монотонное увеличение дифференциального сечения при росте энергии протонов от 3,7 до 7,0 МэВ.

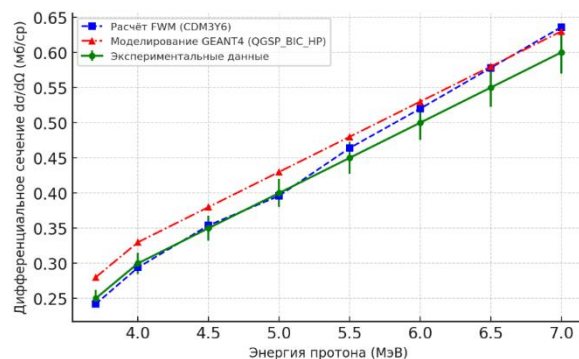


Рисунок 6. Сравнение дифференциального сечения $d\sigma/d\Omega$ для упругого рассеяния протонов на ядре ^{14}C в зависимости от энергии протонов. Результаты расчётов методом полных волн (FWM) с использованием оптического потенциала CDM3Y (■) сопоставлены с экспериментальными данными (●) и моделированием методом Монте-Карло в Geant4 (▲).

Для оценки расхождения между расчётными и экспериментальными данными использовалась стандартная формула относительного отклонения:

$$\Delta_i = \frac{|\sigma_i^{\text{calc}} - \sigma_i^{\text{exp}}|}{\sigma_i^{\text{exp}}} \cdot 100\%, \quad (12)$$

где σ_i^{calc} – рассчитанное значение дифференциального сечения, σ_i^{exp} – экспериментальное значение.

Для отображения достоверности экспериментальных данных на графиках использованы вертикальные погрешности (error bars), рассчитанные по выражению:

$$\delta\sigma_i = \sigma_i^{\text{exp}} \cdot \varepsilon, \quad (13)$$

где ε – относительная экспериментальная погрешность (в настоящей работе принята $\varepsilon = 0,05$, что соответствует 5% статистической ошибке, указанной в работе [1]). Отклонения и причины: расхождения между результатами Geant4 и данными эксперимента/FWM обусловлены отсутствием чувствительности к деталям ядерной структуры в каскадных моделях адронного взаимодействия, используемых в Geant4. Эти модели не учитывают микроскопические взаимодействия и интерференцию парциальных волн, в отличие от метода полных волн.

Особенности: результаты, полученные методом полных волн (FWM), показывают отличное согласие с экспериментальными данными на всём энергетическом интервале; относительные отклонения не превышают 6%. Это подтверждает высокую прогностическую способность оптического потенциала на основе CDM3Y6 и точность реализованного квантово-механического формализма полных волн. Моделирование в Geant4 воспроизводит общий характер зависимости, но систематически переоценивает сечения при низких энергиях (до 8%) и немного недооценивает их при высоких энергиях (примерно на 5%).

Выводы: отличное совпадение результатов FWM с экспериментом подтверждает обоснованность использования фолдинг-потенциала CDM3Y6 и демонстрирует чувствительность модели к внутренним распределениям плотности, включая возможные эффекты кластеризации и нейтронного гало. Близость результатов FWM и эксперимента служит валидацией теоретической модели. Несмотря на меньшую точность Geant4 при низких энергиях, его соответствие общей тенденции указывает на потенциальную применимость в инженерных симуляциях при условии предварительной калибровки по микроскопической теории.

Это сравнение по нескольким методам подчёркивает важность комбинирования квантово-механического анализа и методов Монте-Карло для надёжной оценки явлений ядерного рассеяния.

Следует отметить, что расхождения между результатами моделирования в Geant4 и расчётами методом полных волн (FWM) связаны с фундаментальными отличиями моделей. В частности, используемый в Geant4 Physics List QGSP_BIC_HP основан на каскадных и полуфеноменологических приближениях, которые хорошо описывают нуклон-нуклонные взаимодействия на средних и высоких энергиях, но не учитывают фолдинг-потенциалы и интерферен-

цию парциальных волн, критически важные в низкоэнергетическом диапазоне. Кроме того, результаты Geant4 чувствительны к выбору Physics List, и при использовании альтернативных моделей (например, FTFP_BERT или INCL++) могут проявляться количественные отличия. Это указывает на необходимость дальнейшей оптимизации симуляций, в том числе с включением более точных микроскопических параметризаций оптических потенциалов.

В литературе опубликован ряд теоретических работ, посвящённых описанию упругого рассеяния протонов на лёгких ядрах. Наиболее широко применяются оптическая модель и метод возмущений (DWBA), реализованные в программных комплексах FRESKO [30] и DWUCK [31], которые до сих пор активно используются для анализа ядерных реакций. Так, в работе [1] были проведены фазовые анализы для реакции $^{14}\text{C}(p,p)^{14}\text{C}$ и показано, что оптическая модель воспроизводит экспериментальные данные. Более современные исследования аналогичных систем, например рассеяния протонов на ядрах ^{12}C и ^{13}C , также выполнены в рамках DWBA и модифицированных оптических моделей [32, 33]. Однако для ядра ^{14}C именно в низкоэнергетическом диапазоне 3,7–7,0 МэВ опубликованных расчётов практически нет. В этом контексте предложенный комбинированный подход, основанный на методе полных волн (FWM) и моделировании в Geant4, реализован впервые, что подчёркивает как новизну настоящей работы, так и её значимость для верификации существующих моделей. Следует отметить, что применение пакета Geant4 для моделирования процессов взаимодействия протонов с материалами активно развивается и в Казахстане. В частности, в работе [34] рассмотрено моделирование ядерных реакций лёгких ядер с использованием методов оптической модели и Monte Carlo-подходов, а в исследовании [35] представлены результаты отечественных расчётов по упругому рассеянию протонов и лёгких ядер на ^{12}C с применением оптической модели.

Наличие экспериментальных данных в ограниченном энергетическом диапазоне позволяет использовать их для верификации теоретической модели посредством сопоставления результатов с измерениями и параллельными расчётами на платформе Geant4. Согласие между теоретическими прогнозами, численным моделированием и экспериментом создаёт обоснованную предпосылку для распространения модели на энергии, ещё не охваченные экспериментальными исследованиями. В этом контексте возможно прогнозирование дифференциальных сечений на новых энергетических уровнях, что открывает путь для последующей экспериментальной проверки. В рамках представленной работы эти предпосылки были частично реализованы: теоретические расчёты FWM и моделирование Geant4 показали удовлетворительное согласие с существующими дан-

ными, что позволяет делать предварительные прогнозы для энергий, не охваченных экспериментом.

Для более точного моделирования в будущем планируется тестирование других наборов физических моделей (Physics Lists), таких как INCL++ или FTTP_BERT, которые могут лучше учитывать низкоэнергетические ядерные эффекты.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе была разработана строгая и количественно верифицированная методика анализа упругого рассеяния протонов на экзотическом ядре ^{14}C в энергетическом диапазоне 3,7–7,0 МэВ. Основные итоги можно сформулировать следующим образом:

1. Реализован комбинированный подход, включающий: микроскопическое квантово-механическое моделирование методом полных волн (FWM); моделирование в среде Geant4 с использованием Physics List QGSP_BIC_HP; сравнение с экспериментальными данными при угле $\theta = 90^\circ$.

2. Оптический потенциал построен на основе: реальной части из микроскопического двойного фолдинг-взаимодействия CDM3Y6; мнимой части в форме потенциала Вудса-Саксона. Уравнение Шрёдингера решалось методом Рунге - Кутты 8-го порядка с учётом спин-орбитального взаимодействия.

3. Расчётные дифференциальные сечения $d\sigma/d\Omega$ показали хорошее согласие с экспериментом (погрешность от 1% до 6%). Основной вклад в амплитуду рассеяния вносили парциальные волны $\ell = 2$ и $\ell = 4$.

4. Рост фазовых сдвигов $\delta\ell$ и увеличение сечения при $\theta = 90^\circ$ с ростом энергии, особенно выше 5,5 МэВ, указывают на отклонения от стандартных оптических моделей. Это согласуется с наличием экзотических структур в ^{14}C нейтронно-обогащенной оболочки, гало- и α -кластеров.

5. Моделирование в Geant4 воспроизводит общую энергетическую зависимость с точностью 5–8%, но не отражает тонкие эффекты ядерной структуры. Это объясняется ограничениями каскадных моделей, не учитывающих фолдинг-потенциалы и интерференцию парциальных волн.

6. Метод полных волн (FWM) зарекомендовал себя как теоретический эталон, служащий основой для сопоставления с численным моделированием. Это формирует надёжную иерархию верификации: теория $\rightarrow$ моделирование $\rightarrow$ эксперимент, применимую как к уже изученному диапазону энергий, так и к энергиям, для которых экспериментальные данные ещё отсутствуют.

7. Проведённый анализ продемонстрировал чувствительность методики к параметрам потенциала (например, изменение V_0 или W_0 на ± 5 МэВ приводит к изменению сечения на ± 10 –15%). Это открывает возможности для обратного моделирования структуры экзотических ядер.

Следует отметить, что в диапазоне энергий 3,7–7,0 МэВ в международной базе EXFOR отсутствуют дополнительные экспериментальные данные по реак-

ции $^{14}\text{C}(p,p)$. Таким образом, результаты работы [1], использованные в данной статье, остаются единственным достоверным источником для сравнения, что подчёркивает актуальность выполненного исследования.

Численная симуляция на платформе Geant4 использовалась как инструмент верификации предсказаний FWM. Geant4 реализует физические процессы протон-ядерного взаимодействия, основанные на фундаментальных законах и экспериментально проверенных сечениях, включая упругое и неупругое рассеяние, а также электромагнитные взаимодействия. Согласие результатов FWM с симуляцией Geant4 повышает доверие к применимости теории для диапазонов энергий, где экспериментальные данные отсутствуют.

Таким образом, предложенная методология представляет собой мощный инструмент для исследования кластеризации, нейтронных оболочек и плотностных профилей в нейтрон-избыточных лёгких ядрах. Полученные результаты могут быть использованы в практических областях, таких как дозиметрия, радиационная защита и материаловедение, для точной оценки взаимодействия протонных пучков с ядрами и оптимизации конструкций и материалов, работающих под воздействием ионизирующего излучения.

ЛИТЕРАТУРА / REFERENCES

1. Murillo G., Fernández M., Ramírez J., Mejía-Gil M.G., Policroniades R., Varela A. et al. Characterization of excited states of ^{15}N through $^{14}\text{C}(p,p)^{14}\text{C}$ using polarized proton beam // *Revista Mexicana de Física S.* – 2011. – Vol. 57, No. 1. – P. 55–59.
2. Khoa D.T., Satchler G.R., von Oertzen W. Folding model analysis of proton elastic scattering on exotic nuclei // *Phys. Rev. C.* – 1994. – Vol. 49, No. 4. – P. 1652–1661.
3. Khoa D.T., Khanh D.C., Loc B.M. Extended versions of the M3Y interaction and nuclear matter incompressibility // *Phys. Rev. C.* – 2016. – Vol. 94. – P. 034612.
4. Ray L. Proton–nucleus elastic scattering and the optical model // *Phys. Rev. C.* – 1979. – Vol. 19. – P. 1855–1872.
5. Satchler G.R., Love W.G. Folding model potentials from realistic interactions for heavy-ion scattering // *Phys. Rep.* – 1979. – Vol. 55, No. 3. – P. 183–254.
6. Horiuchi W., Suzuki Y. Nuclear reaction radii and matter radii of unstable nuclei // *Phys. Rev. C.* – 2006. – Vol. 74. – P. 034311.
7. Tanihata I. Neutron halo nuclei // *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* – 1996. – Vol. 22. – P. 157.
8. Bertulani C.A., Danielewicz P., Liendo J.A. Introduction to Nuclear Reactions. – Bristol: IOP Publishing, 2021. – 365 p.
9. Rawitscher G.H. Microscopic optical model potential using the g matrix // *Phys. Rev. C.* – 1982. – Vol. 25. – P. 2196.
10. Gadioli E., Hodgson P.E. Pre-Equilibrium Nuclear Reactions. – Oxford: Clarendon Press, 1992. – 424 p.
11. An C., Cai X. Microscopic optical potentials based on a density-dependent M3Y interaction // *Phys. Rev. C.* – 2006. – Vol. 73. – P. 054605.

12. Koning A.J., Delaroche J.P. Local and global nucleon optical models from 1 keV to 200 MeV // Nucl. Phys. A. – 2003. – Vol. 713. – P. 231–310.
13. Mahaux C., Sartor R. Dispersion relation for the optical-model potential // Adv. Nucl. Phys. – 1991. – Vol. 20. – P. 1–223.
14. Watanabe S. High energy elastic scattering of nucleons and the optical model // Nucl. Phys. – 1958. – Vol. 8. – P. 484–492.
15. Chamon L.C. et al. Toward a global description of the nucleus–nucleus interaction // Phys. Rev. C. – 1997. – Vol. 55. – P. 235.
16. Hodgson P.E. The Optical Model of Elastic Scattering. – Oxford: Clarendon Press, 1963. – 284 p.
17. Satchler G.R. Direct Nuclear Reactions. – Oxford: Clarendon Press, 1983. – 582 p.
18. Gadioli-Erba E., Hodgson P.E. Pre-Equilibrium Reactions and Nuclear Models. – Oxford: Pergamon Press, 1981. – 452 p.
19. Varner R.L. et al. A global nucleon optical model potential // Phys. Rep. – 1991. – Vol. 201, No. 2. – P. 57–119.
20. Capote R. et al. RIPL – Reference Input Parameter Library for Calculation of Nuclear Reactions and Nuclear Data Evaluations // Nucl. Data Sheets. – 2009. – Vol. 110, No. 12. – P. 3107–3214.
21. EXFOR – Experimental Nuclear Reaction Data. – IAEA, Vienna. – URL: <https://www-nds.iaea.org/exfor>
22. Geant4 Collaboration. GEANT4 – A simulation toolkit // Nucl. Instrum. Meth. A. – 2003. – Vol. 506. – P. 250–303.
23. Agostinelli S. et al. GEANT4: A simulation toolkit // Nucl. Instrum. Meth. A. – 2003. – Vol. 506, No. 3. – P. 250–303.
24. Allison J. et al. Recent developments in Geant4 // Nucl. Instrum. Meth. A. – 2016. – Vol. 835. – P. 186–225.
25. Chauhan R. et al. Elastic scattering of protons using Geant4: Application to nuclear materials // Nucl. Phys. A. – 2020. – Vol. 1007. – P. 122107.
26. Shultis J.K., Faw R.E. Radiation Shielding. – La Grange Park: ANS, 2000. – 352 p.
27. Forrest R.A. FISPACT-2005: User manual. – UKAEA FUS 534, 2005. – 153 p.
28. EXFOR Manual. – IAEA, 2020. – URL: <https://www-nds.iaea.org/publications/exfor-manual.pdf>
29. Koning A.J., Rochman D. Modern nuclear data evaluation with the TALYS code system // Nucl. Data Sheets. – 2012. – Vol. 113. – P. 2841–2934.
30. Thompson I.J. Coupled reaction channels calculations in nuclear physics // Comput. Phys. Rep. – 1988. – Vol. 7, No. 4. – P. 167–212.
31. Kunz P.D. DWUCK4: Distorted Wave Born Approximation Program. – University of Colorado, 1990. – 74 p.
32. Soad A., Ali M.K. Dispersive optical model analysis of proton–nucleus elastic scattering at low and intermediate energies // Eur. Phys. J. A. – 2021. – Vol. 57. – P. 201.
33. Aharonian H. et al. Elastic scattering of protons on light nuclei within the optical model // J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. – 2022. – Vol. 49, No. 11. – P. 115103.
34. Dabýlova A. et al. Nuclear reaction modeling and simulation of light nuclei within optical model approaches // Proc. Int. Conf. NUCLEUS-2021. – Курчатов: НЯЦ РК, 2021. – P. 112–118.
35. Gusseinova D., Alimov D., Kenzhebayev N. et al. Optical model analyses for the elastic scattering of ^8B , ^7Be and ^6Li with ^{12}C // ANSA Journal. – 2024. – Vol. 5, No. 1. – P. 24–33.

3,7-7,0 МЭВ ДИАПАЗОНЫНДА ^{14}C ПРОТОННЫҢ СЕРПІМДІ ШАШЫРАУЫ МЫСАЛЫНДА ТЕОРИЯЛЫҚ ЖӘНЕ САНДЫҚ ӘДІСТЕРДІҢ АЙҚАС-ТЕКСЕРУ ӘДІЛДІГІН ТЕКСЕРУ

Ш. М. Кажыкенов^{1,2*}, Д. М. Джансейтов^{2,3}, Д. С. Валиолда^{2,3}, И. В. Алтухов¹, М. К. Калиев⁴

¹ Д. Серікбаев атындағы Шығыс Қазақстан техникалық университеті, Өскемен, Қазақстан

² Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан

³ ҚР Атом энергиясы жөніндегі агенттігінің «Ядролық физика институты» РМК, Алматы, Қазақстан

⁴ Тәуелсіз зерттеуші, Өскемен, Қазақстан

* Байланыс үшін E-mail: nuclearshalkar@gmail.com

Бұл жұмыста 3,7 ден 7,0 МэВ ге дейінгі энергия диапазонында ^{14}C ядросында протондардың серпімді шашырауын талдауға арналған кешенді тәсіл ұсынылады. Тәсіл кванттық механикалық Full Wave Method FWM, Geant4 негізіндегі Монте Карло модельдеуі және эксперименттік деректерді біріктіреді. Фаза ығысулары Шредингер теңдеуін шешу арқылы алынды. Оптикалық потенциал микроскопиялық CDM3Y өзара әрекеттесуі және мним бөлігі үшін Вудс Саксон параметризациясы негізінде құрылды, сондай ақ спин орбиталық үлес ескерілді. Алынған дифференциалдық қималар эксперименттік өлшемдермен және Geant4 модельдеу нәтижелерімен салыстырылды, айырмашылық 3 ден 6 процентке дейінгі шекте қалды. 5,5 МэВ тен жоғары энергияларда фаза ығысулары мен қималардың бейсызық өсуі стандартты оптикалық мінез құлықтан ауытқуды көрсетеді. Бұл құбылыстар ^{14}C ядросының кластерлік немесе галоға ұқсас құрылымының болуын меңзейді. Ұсынылған гибриді әдіс теориялық есептеулер мен модельдеуді эксперименттік деректермен сәйкестендіруге мүмкіндік береді және зерттелмеген энергия аймақтарындағы реакцияларды талдауда, сондай ақ материалдардағы радиациялық әсерлерді модельдеуде қолданылуы мүмкін.

Түйін сөздер: ядролық реакциялар, ядролық теория, CDM3Y потенциалы, экзотикалық ядролар, p қабықша ядролары, протондардың көміртекке шашырауы, Geant4, оптикалық модель, Full Wave Method FWM.

VALIDATION OF CROSS CHECKING BETWEEN THEORETICAL AND NUMERICAL
METHODS USING THE EXAMPLE OF PROTON ELASTIC SCATTERING ON ^{14}C
IN THE ENERGY RANGE FROM 3.7 TO 7.0 MeV

Sh. M. Kazhykenov^{1,2*}, D. M. Zhansseitov^{2,3}, D. S. Valiolda^{2,3}, I. V. Altukhov¹, M. K. Kaliyev⁴

¹ D. Serikbayev East Kazakhstan Technical University, Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan

² Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan

³ RSE “Institute of Nuclear Physics” of the Agency of the Republic of Kazakhstan for Atomic Energy, Almaty, Kazakhstan

⁴ Independent researcher, Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan

* E-mail for contacts: nuclearshalkar@gmail.com

This work presents an integrated approach to the analysis of proton elastic scattering on the ^{14}C nucleus in the energy range from 3.7 to 7.0 MeV. The approach combines the quantum mechanical Full Wave Method FWM, Monte Carlo simulations based on Geant4, and experimental data. Phase shifts were obtained by solving the Schrödinger equation with an optical potential constructed from the microscopic CDM3Y interaction and a Woods Saxon parameterization for the imaginary part, including the spin orbit contribution. The calculated differential cross sections were compared with experimental measurements and Geant4 simulations, showing agreement within 3 to 6 percent. The observed nonlinear increase in phase shifts and cross sections above 5.5 MeV indicates deviations from standard optical behavior. These features suggest a cluster like or halo influenced structure of the ^{14}C nucleus, confirming its non trivial internal configuration. The proposed hybrid methodology aligns theoretical calculations and simulations with experimental data and can be applied to reactions in unexplored energy regions, as well as to modeling radiation effects in materials.

Keywords: nuclear reactions, nuclear theory, CDM3Y potential, exotic nuclei, p shell nuclei, proton scattering on carbon, Geant4, optical model, Full Wave Method FWM.

<https://doi.org/10.52676/1729-7885-2025-4-209-213>

УДК 538.9

СИНТЕЗ НАНОКРИСТАЛЛОВ CuO МЕТОДОМ ЭЛЕКТРООСАЖДЕНИЯ В ТРЕКОВЫХ СТРУКТУРАХ

А. Д. Акылбекова*, Т. Д. Ахмеди, Г. Г. Сарсехан

НАО «Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева», Астана, Казахстан

** E-mail для контактов: aiman88_88@mail.ru*

В работе представлен эффективный метод синтеза массивов нанокристаллов оксида меди (CuO) в трековых диэлектрических структурах методом электрохимического осаждения (ЭХО) и проведено комплексное изучение их структурных, морфологических и оптических свойств. Электроосаждение реализовано в специально подобранном электролите в потенциостатическом режиме, что обеспечило воспроизводимое и селективное заполнение наноканалов трековой матрицы. В качестве шаблона использовалась пористая структура, сформированная путём ионного облучения диоксида кремния с последующим травлением.

Метод ЭХО отличается рядом преимуществ: простота технологического процесса, его низкая энергоёмкость, экологическая безопасность, отсутствие необходимости в высокотемпературном отжиге и дорогостоящем вакуумном оборудовании, а также возможность осаждения на подложки со сложной геометрией. Морфология поверхности и топография пор заполненных и незаполненных каналов проанализированы с использованием сканирующей электронной микроскопии (СЭМ). Фазовый состав и кристаллическая структура осаждённого материала исследованы методом рентгеновской дифракции (РД), подтвердив образование фазы CuO с моноклинной решёткой (пространственная группа C2/c).

Спектральные характеристики изучались методом фотолюминесцентной спектроскопии, в результате чего обнаружены характерные пики испускания в диапазоне 3,11–3,22 эВ, что соответствует фиолетовой области спектра. Эти пики обусловлены межзонными переходами и рекомбинацией носителей заряда через локализованные дефектные состояния в кристаллической структуре CuO. Отдельное внимание уделено влиянию геометрических параметров пор и условий осаждения на распределение и качество заполнения каналов.

Полученные результаты демонстрируют потенциал предлагаемого подхода для создания функциональных наноструктур CuO с заданными свойствами и геометрией. Разработанная методология может быть использована при создании сенсорных систем, элементов фотонной электроники, а также в технологии энергоэффективных устройств на основе оксидов переходных металлов.

Ключевые слова: оксид меди, электроосаждение, наноканалы, трековая мембрана, фотолюминесценция.

ВВЕДЕНИЕ

Оксид меди (CuO) представляет собой перспективный полупроводниковый материал р-типа с узкой запрещённой зоной (в пределах 1,5–2 эВ), благодаря чему он эффективно поглощает свет в видимом диапазоне.

Кристаллическая решётка CuO характеризуется высокой плотностью атомной решётки, наличием поверхностных дефектов и высокой химической активностью, что обуславливает его уникальные свойства и расширяет область возможных применений. В настоящее время CuO активно изучается в качестве функционального материала для гетерогенных катализаторов, газочувствительных сенсоров, оптических переключателей, элементов запоминающих устройств, эмиттеров, высокотемпературных сверхпроводников, а также в составе фотоэлектрических преобразователей и солнечных элементов нового поколения [1–7].

Особое значение приобретает синтез наноструктурированной формы CuO, такой как наночастицы, наностолбики, нанопроволоки и наноплёнки, поскольку при уменьшении масштаба существенно изменяются его электрические, оптические и фотонные свойства. Регулирование морфологии и размерных характеристик нанокристаллов обеспечивает целенаправленное

управление их функциональными свойствами, что имеет критическое значение для специализированных областей применения, включая фотолюминесценцию, газочувствительность, фотопроводимость и каталитическую активность в процессах фотокатализа.

В последние годы разработан широкий спектр методов синтеза наноструктур CuO, включая гидротермальный синтез, осаждение из растворов, термическое окисление, золь-гель технологию, химическое осаждение из газовой фазы и ряд других подходов. Эти методы позволяют варьировать морфологические и фазовые характеристики наноструктур с целью оптимизации их функциональных свойств [8–12].

Однако большинство перечисленных методов требует высоких температур, значительных временных затрат или применения сложного оборудования. В этой связи электрохимическое осаждение (ЭХО) представляет собой технологически привлекательную альтернативу: метод прост в реализации, экономичен, не требует высоких температур и позволяет направленно формировать наноструктуры даже на подложках со сложной геометрией. Кроме того, ЭХО обеспечивает возможность селективного осаждения материала в локализованных объёмах, что делает его

особенно перспективным при использовании трековых пористых шаблонов, получаемых методом ионной модификации диэлектриков.

Тем не менее, несмотря на значительное количество публикаций, посвящённых синтезу CuO, исследования, ориентированные на получение нанокристаллов оксида меди методом ЭХО в организованных пористых матрицах, остаются ограниченными. В особенности недостаточно изучены закономерности заполнения трековых каналов, влияние условий осаждения на морфологию кристаллов и их оптические свойства.

Цель настоящей работы заключается в разработке и реализации метода электрохимического осаждения нанокристаллов оксида меди (CuO) в трековые пористые шаблоны, а также в комплексном исследовании морфологических, структурных и оптических характеристик полученных наноструктур. Особое внимание уделяется изучению влияния условий электроосаждения на полноту заполнения каналов, кристаллическую фазу осаждённого материала и особенно фотолюминесцентного отклика.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Формирование трековой пористой структуры проводилось на подложках из монокристаллического кремния n-типа (ориентация $\langle 100 \rangle$) с удельным сопротивлением ~ 10 Ом·см. Вначале на поверхность подложек наносился диоксид кремния (α -SiO₂) путём термического окисления в атмосфере влажного кислорода при температуре 900 °С. В результате термического процесса формировался диэлектрический слой SiO₂ толщиной ~ 700 нм, равномерно покрывающий всю поверхность образца.

Для создания треков в сформированном слое диоксида кремния образцы подвергались облучению тяжёлыми ионами ксенона (Xe). Выбор энергии облучения 200 МэВ обусловлен необходимостью формирования непрерывных латентных треков в слое SiO₂. Флюенс $1 \cdot 10^8$ ион/см² обеспечивает статистически равномерное распределение каналов без их перекрытия, что является оптимальным для получения упорядоченной нанопористой структуры. В результате взаимодействия ионов с материалом в диэлектрике формировались скрытые повреждённые области – так называемые «латентные треки», ориентированные перпендикулярно поверхности подложки.

Для открытия пор и формирования системы ориентированных каналов трековые треки подвергались химическому травлению в водном растворе плавиковой кислоты (HF) низкой концентрации (обычно 2–4%) в течение заданного времени. При этом образовывались наноканалы конической формы, диаметр которых определялся временем травления и параметрами треков.

Электрохимическое осаждение CuO в поры трекового шаблона проводилось методом потенциостатического осаждения. Электролитический раствор включал следующие компоненты: медный купорос CuSO₄·5H₂O – 5 г/л, виннокаменную кислоту калий-натрий (KNaC₄H₄O₆·4H₂O) – 18 г/л, и гидроксид на-

трия (NaOH) – 7 г/л. Значение pH рабочего раствора составляло 10, что обеспечивало стабильность комплекса меди в растворе и контролируемое осаждение. Электроосаждение осуществлялось при комнатной температуре (18 ± 1 °С) в течение 30 минут при фиксированном потенциале 2,5 В относительно стандартного электрода сравнения (Ag/AgCl). Контакт с подложкой обеспечивался посредством токопроводящего клея на основе серебра.

По завершении осаждения образцы промывались деионизированной водой и сушились в потоке азота. Для анализа полученных наноструктур применялись методы сканирующей электронной микроскопии (СЭМ), рентгеновской дифрактометрии (РД) и фотолюминесцентной спектроскопии (ФЛ). Морфология, структура и спектральные характеристики осаждённого материала анализировались с целью установления взаимосвязи между условиями осаждения и полученными свойствами CuO.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Морфология наноструктур CuO, осаждённых на трековые темплэйты α -SiO₂/Si-n (аморфный SiO₂ на Si n-типа), была исследована методом сканирующей электронной микроскопии (СЭМ). На СЭМ-изображениях поверхности образцов после электроосаждения наблюдаются поры с различной степенью заполненности. Установлено, что часть наноканалов трекового шаблона остаётся незаполненной, их диаметр составляет примерно 340–380 нм (рисунок 1). В ряде каналов отмечается перерастекание осаждаемого материала за пределы пор, формируя выпуклые каплевидные образования («шапки») на поверхности с диаметром до 1,3 мкм.

Перераспределение материала указывает на неконтролируемый рост кристаллов CuO на поздних стадиях осаждения, что связано с эффектом локального перенасыщения и ионной диффузией в зону пор. Несмотря на частично незаполненные каналы, полученные данные демонстрируют высокую степень заполнения трековых пор, подтверждая эффективность предложенного метода электрохимического осаждения.

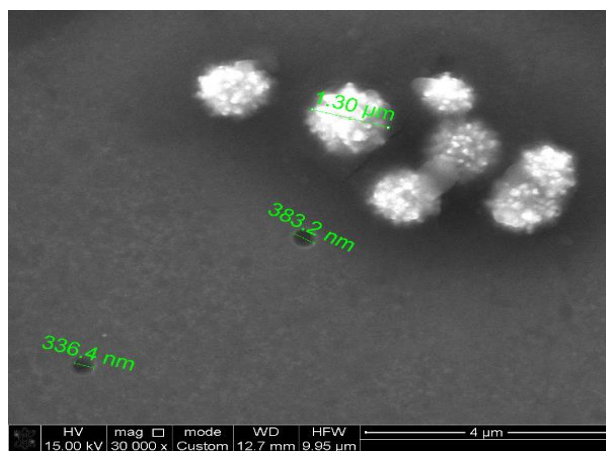


Рисунок 1. СЭМ-изображение поверхности образца CuO/SiO₂/Si после электрохимического осаждения в течение 30 мин при напряжении 2,5 В

Фазовый состав осаждённого материала был определён методом рентгеновской дифрактометрии (РД). При интерпретации рентгенодифракционных данных использована международная справочная база ICDD; фазовая идентификация выполнена с использованием стандартной PDF-карты CuO (PDF #41-0254), что позволило однозначно подтвердить формирование моноклинной модификации CuO. На полученных дифрактограммах регистрируются выраженные дифракционные пики, соответствующие моноклинной модификации CuO с пространственной группой симметрии C2/c (№ 15). Наиболее интенсивные пики наблюдаются в окрестностях углов $2\theta \approx 33^\circ$, $35,70^\circ$ и $35,79^\circ$, что соответствует плоскостям (110), (002) и (111) соответственно (рисунок 2). Расчёт межплоскостных расстояний и параметров элементарной ячейки показал соответствие стандартным справочным данным, что подтверждает формирование фазо-чистого CuO без примесей оксида меди (I) или гидроксидных фаз.

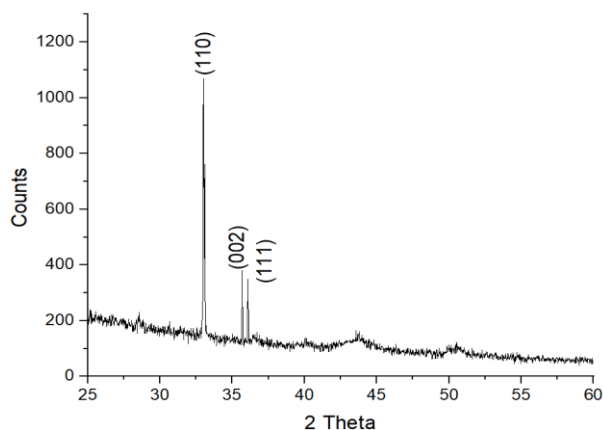


Рисунок 2. Рентгеновская дифрактограмма образцов CuO, полученных методом электрохимического осаждения в течение 30 мин при напряжении 2,5 В

Параметры кристаллической решётки CuO, определённые по положению дифракционных максимумов, составляют: $a = 4,7162 \text{ \AA}$, $b = 3,3582 \text{ \AA}$, $c = 5,1126 \text{ \AA}$ – что типично для моноклинной структуры. Это свидетельствует о том, что при выбранных условиях осаждения происходит направленный кристаллический рост без аморфизации материала.

Спектры фотолюминесценции (ФЛ) нанокристаллов CuO были зарегистрированы с помощью спектрофлуориметра CM2203 при возбуждении ксеноновой лампой с длиной волны 250 нм. Излучение регистрировалось в диапазоне длин волн от 375 до 415 нм при комнатной температуре. Дифференциальный спектр ФЛ, полученный после проведения электрохимического осаждения, представлен на рисунке 3.

В спектре ФЛ регистрируются три выраженных пика с максимумами при энергиях 3,11 эВ, 3,18 эВ и 3,22 эВ, что соответствует фиолетовому диапазону спектра. Основной пик при $\sim 3,11 \text{ эВ}$ можно отнести к межзонной рекомбинации с участием запрещённых

прямых переходов, характерных для узкозонных полупроводников. Более высокоэнергетические пики (3,18 эВ и 3,22 эВ) интерпретируются как результат рекомбинации носителей заряда через локализованные дефектные состояния, возникающие в процессе осаждения и/или на границе раздела CuO–диэлектрик. Подобное поведение согласуется с литературными данными [13–16] и подтверждает наличие дефектно-опосредованных оптических переходов в структуре полученного материала.

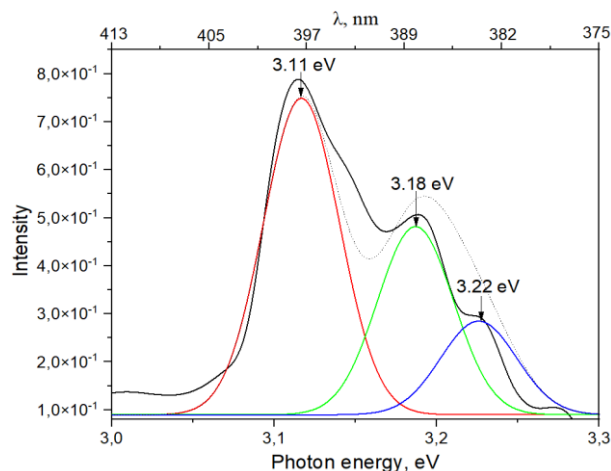


Рисунок 3. Дифференциальный спектры ФЛ после ЭХО при 2,5 В.

Таким образом, полученные морфологические, фазовые и спектральные данные свидетельствуют о высокой эффективности предложенного метода синтеза CuO в трековых структурах. Электрохимическое осаждение позволяет не только формировать массивы нанокристаллов с заданной ориентацией, но и варьировать их структурные и оптические характеристики за счёт изменения параметров осаждения. Эти результаты открывают перспективы для применения полученных структур в сенсорике, фотонике и других областях нанотехнологий.

Выводы

В настоящей работе продемонстрирована возможность направленного синтеза нанокристаллов оксида меди (CuO) методом электрохимического осаждения в трековые пористые шаблоны, сформированные на основе оксидированных кремниевых подложек. Применение метода потенциостатического осаждения в щелочной среде ($\text{pH} = 10$) с использованием комплексного электролита позволило обеспечить воспроизводимое заполнение наноканалов с частичным выходом материала на поверхность.

Морфологический анализ показал формирование как полностью заполненных каналов, так и выпуклых каплевидных структур («шапок») на поверхности, обусловленных перерастеканием материала. Средний диаметр таких образований достигал $\sim 1,3 \text{ мкм}$, тогда как диаметр исходных незаполненных пор составлял 340–380 нм, что свидетельствует о высокой

активности роста наноструктур в условиях локализованного ионного транспорта.

Рентгеноструктурный анализ подтвердил формирование фазы CuO с моноклинной кристаллической решёткой (пространственная группа C2/c) без признаков примесей других фаз меди. Параметры элементарной ячейки соответствуют справочным данным, что указывает на высокую степень кристалличности полученного материала.

Фотолюминесцентные исследования выявили наличие характерных эмиссионных пиков в диапазоне 3,11–3,22 эВ, соответствующих фиолетовой области спектра. Анализ спектров показал, что люминесценция обусловлена как межзонными переходами, так и рекомбинацией носителей заряда через локализованные дефектные состояния, возникающие на границах кристаллитов и при взаимодействии с матрицей.

В ходе исследования подтверждён фазо-чистый характер синтезированного CuO, определены параметры его элементарной ячейки, охарактеризована морфология заполнения трековых каналов, а также идентифицированы фотолюминесцентные пики, природа которых связана как с межзонными переходами, так и с дефектными состояниями.

Таким образом, метод электрохимического осаждения проявил себя как эффективный и доступный способ получения структурированных наноматериалов CuO в упорядоченных трековых каналах. Простота и масштабируемость метода, а также возможность направленного контроля морфологии и фазового состава открывают широкие перспективы для практического применения полученных структур, включая создание сенсорных платформ, фотокаталитических систем, элементов наноэлектроники и функциональных покрытий.

ЛИТЕРАТУРА / REFERENCES

1. Zhuang Z.J., Su X.D., Yuan H.Y., Sun Q., Xiao D., Choi M.M.F. Optical determination of copper oxide nanocrystals // *Analyst*. – 2008. – Vol. 133. – P. 126.
2. Gao P., Chen Y.J., Lv H.J., Li X.F., Wang Y., Zhang Q. Study of CuO nanostructures for hydrogen energy applications // *International Journal of Hydrogen Energy*. – 2009. – Vol. 34. – P. 3065–3071.
3. Zhang X.J., Wang G.F., Liu X.W., Wu J.J., Li M., Gu J., Liu H., Fang B. Synthesis and characterization of CuO nanocrystals // *Journal of Physical Chemistry C*. – 2008. – Vol. 112. – P. 16845–16849.
4. Zou G.F., Li H., Zhang D.W., Xiong K., Dong C., Qian Y.T. CuO nanowires prepared by solution route // *Journal of Physical Chemistry B*. – 2006. – Vol. 110. – P. 1632–1636.
5. Li Y., Kuai P.Y., Huo P.P., Liu C.J. Structural and optical properties of CuO nanocrystals // *Materials Letters*. – 2009. – Vol. 63. – P. 188–191.
6. Xu H.L., Wang W.Z., Zhu W. Synthesis and photocatalytic properties of CuO nanocrystals // *Journal of Physical Chemistry B*. – 2006. – Vol. 110. – P. 13829–13834.
7. Tang A.D., Xiao Y., Ouyang J., Nie S. Electrical and magnetic properties of CuO nanoparticles // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2008. – Vol. 457. – P. 447–451.
8. Lu C., Qi L., Yang J., Zhang D., Wu N., Ma J. Controlled growth of CuO nanorods // *Journal of Physical Chemistry B*. – 2004. – Vol. 108. – P. 17825–17829.
9. Zhang W., Wen X., Yang S. Synthesis of uniform CuO nanostructures // *Inorganic Chemistry*. – 2003. – Vol. 42. – P. 5005–5008.
10. Huang L., Yang S., Li T., Gu B., Du Y., Lu Y., Shi S. Growth mechanism of CuO crystals // *Journal of Crystal Growth*. – 2004. – Vol. 260. – P. 475–480.
11. Wang W., Zhan Y., Wang X., Liu Y., Zheng C., Wang G. CuO nanocrystals: preparation and application // *Materials Research Bulletin*. – 2002. – Vol. 37. – P. 1093–1098.
12. Zhu R., Chen C., Hao L., Hu Y., Chen Z. Defect structure and magnetic properties of CuO nanocrystals // *Solid State Communications*. – 2004. – Vol. 130. – P. 681–684.
13. Ningthoujam R.S., Gajbhiye N.S., Ahmed A., Umre S.S., Sharma S.J. Synthesis and PL of CuO nanoparticles // *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*. – 2008. – Vol. 8. – P. 3059–3064.
14. Singh L.R., Ningthoujam R.S., Sudarsan V., Singh S.D., Kulshreshtha S.K. Photoluminescence of CuO nanocrystals // *Journal of Luminescence*. – 2008. – Vol. 128. – P. 1544–1550.
15. Ningthoujam R.S., Sudarsan V., Kulshreshtha S.K. Optical behavior of CuO nanocrystals // *Journal of Luminescence*. – 2007. – Vol. 127. – P. 747–752.
16. Hu J.Q., Bando Y. Growth and optical properties of single-crystal tubular ZnO whiskers // *Applied Physics Letters*. – 2003. – Vol. 82. – P. 1401–1403.

ТРЕКТІ ҚҰРЫЛЫМДАРДА CuO НАНОКРИСТАЛДАРЫН ЭЛЕКТРОХИМИЯЛЫҚ ТҮНДЫРУ ӘДІСІМЕН СИНТЕЗДЕУ

А. Д. Акылбекова*, Т. Д. Ахмеді, Г. Г. Сарсехан

«Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті» КеАҚ, Астана, Қазақстан

** Байланыс үшін E-mail: aiman88_88@mail.ru*

Осы жұмыста тректі диэлектрлік құрылымдарда электрохимиялық түндыру (ЭХТ) әдісі арқылы мыс оксиді (CuO) нанокристалдарының массивтерін синтездеудің тиімді әдісі ұсынылып, олардың құрылымдық, морфологиялық және оптикалық қасиеттері кешенді түрде зерттелді. Электроосаждение арнайы таңдалған электролитте потенциостатикалық режимде жүргізіліп, тректік матрицадағы наноканалдарды селективті және қайталанбалы түрде толтыруға мүмкіндік берді. Шаблон ретінде иондық сәулелену және одан кейінгі химиялық өңдеу арқылы түзілген кремний диоксидінің кеуекті құрылымы қолданылды.

ЭХТ әдісі технологиялық қарапайымдылығы, төмен энергия тұтынуы, экологиялық қауіпсіздігі, жоғары температурада отжигтің және қымбат вакуумдық жабдықтың қажет етілмеуі, сондай-ақ күрделі геометриялы подложкаларға түндыру мүмкіндігімен сипатталады. Морфология мен кеуек топографиясы сканерлеуші электрондық микроскопия (СЭМ) арқылы, ал фазалық құрам мен кристалдық құрылымы рентгендік дифракция (РД) арқылы анықталды, нәтижесінде моноклинді CuO фазасының (C2/c кеңістіктік тобы) түзілуі расталды.

Фотолюминесценттік зерттеулер бойынша 3,11–3,22 эВ диапазонында эмиссиялық шыңдар анықталды, олар күлгін спектрге сәйкес келеді. Бұл шыңдар зоналық өтулер және локализован дефектілік күй арқылы заряд тасушылардың рекомбинациясымен байланысты. Кеуектердің геометриялық параметрлері мен түндыру шарттары каналдардың толу дәрежесіне және сапасына айтарлықтай әсер ететіні атап көрсетілді.

Алынған нәтижелер берілген қасиеттері мен геометриясы бар функционалдық CuO нанокұрылымдарын жасау мүмкіндігін көрсетеді. Дамытылған әдістеме сенсорлық жүйелерді, фотондық электроника элементтерін және өтпелі металдардың оксидтеріне негізделген энергия үнемдейтін құрылғыларды әзірлеуде қолданылуы мүмкін.

Түйін сөздер: мыс оксиді, электрохимиялық түндыру, наноканалдар, тректік мембрана, фотолюминесценция.

SYNTHESIS OF CuO NANOCRYSTALS BY ELECTROCHEMICAL DEPOSITION IN TRACK STRUCTURES

A. D. Akylbekova*, T. D. Akhmedi., G. G. Sarsekhan

L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan, Astana, Kazakhstan

** E-mail for contacts: aiman88_88@mail.ru*

This work presents an efficient method for synthesising arrays of copper oxide (CuO) nanocrystals in track-etched dielectric structures via electrochemical deposition (ECD) and provides a comprehensive study of their structural, morphological, and optical properties. Electrochemical deposition was performed in a carefully selected electrolyte under a potentiostatic regime, enabling reproducible and selective filling of the nanocanals within the track matrix. The template consisted of a porous silicon dioxide structure formed by ion irradiation followed by etching.

The ECD method is characterised by technological simplicity, low energy consumption, environmental safety, the absence of high-temperature annealing and expensive vacuum equipment requirements, and the possibility of deposition on substrates with complex geometries. The surface morphology and pore topography were analysed using scanning electron microscopy (SEM), while the phase composition and crystal structure of the deposited material were confirmed by X-ray diffraction (XRD), revealing the formation of a monoclinic CuO phase (space group C2/c).

Photoluminescence studies revealed emission peaks in the 3.11–3.22 eV range, corresponding to the violet region of the spectrum. These peaks are attributed to interband transitions and recombination of charge carriers via localised defect states in the CuO crystal structure. The influence of pore geometry and deposition conditions on the distribution and quality of channel filling was also highlighted.

The obtained results demonstrate the potential of the proposed approach for creating functional CuO nanostructures with tailored properties and geometry. The developed methodology can be applied in the fabrication of sensor systems, photonic electronic components, and energy-efficient devices based on transition metal oxides.

Keywords: copper oxide, electrochemical deposition, nanopores, track membrane, photoluminescence.

<https://doi.org/10.52676/1729-7885-2025-4-214-223>

УДК 621.039.5

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИКИ ПАРАМЕТРОВ АКТИВНОЙ ЗОНЫ EPR ПРИ РАБОТЕ НА МОЩНОСТИ

А. К. Мухамедиев*, И. В. Прозорова, А. А. Прозоров, Ю. А. Попов

Филиал «Институт атомной энергии» РГП НЯЦ РК, Курчатову Казахстан

** E-mail для контактов: mukhamediev@nnc.kz*

Актуальность работы связана с анализом активной зоны реактора типа EPR (European Pressurized Reactor) и описанию механизмов управления реактивностью на всех стадиях топливной кампании. Актуальность работы подчеркивается важностью верификации и валидации моделей, описывающих поведение активной зоны в динамике, для обоснования безопасности реакторов нового поколения. Отличительной особенностью работы является моделирование процессов, происходящих в активной зоне реактора поколения III+ с использованием расчетов методом Монте-Карло в программе MCNP. В ходе исследований рассмотрены как активные (регулируемые) параметры реактивности – глубина ввода управляющих стержней и концентрация борной кислоты, так и пассивные – выгорание поглотителей (гадолиния) и накопление продуктов деления. Рассмотрена группа продуктов деления, которая описывает эффекты отравления и шлакования АЗ. Выполнена сравнительная оценка параметров, влияющих на реактивность.

Результаты исследования подтверждают высокую эффективность комплексной системы управления реактивностью в реакторах EPR и демонстрируют необходимость интегрированного подхода к анализу нейтронно-физических характеристик активной зоны, учитывающего как активные, так и пассивные механизмы изменения реактивности. Результаты также будут полезны для анализа и улучшения топливных кампаний как российских ВВЭР, так и зарубежных PWR-реакторов.

Ключевые слова: реактор EPR, реактивность, поглотители, продукты деления, k_{eff} .

ВВЕДЕНИЕ

Европейский реактор с водой под давлением EPR [1], рассчитанный на проектное выгорание порядка 65 ГВт·сут./тU, характеризуется конструктивными решениями, направленными на обеспечение необходимого запаса реактивности, устойчивости оболочечных материалов и управляемости температурных коэффициентов. В процессе длительной эксплуатации происходит постепенное выгорание ядерного топлива, сопровождающееся изменением его изотопного состава, нейтронного спектра и реактивности. Эти изменения оказывают существенное влияние на нейтронно-физические характеристики активной зоны, а следовательно – на показатели безопасности и эффективности реактора.

Выгорание топлива носит пространственно-неравномерный характер: различия наблюдаются между топливными сборками, расположенными вблизи отражателей, регулирующих стержней и на периферии активной зоны. В результате формируются выраженные радиальные и аксиальные градиенты плотности потока нейтронов $\Phi(r, E)$, а также неоднородности нейтронного потока. Совокупность этих факторов приводит к изменению запаса реактивности и требует учета при анализе безопасности и оптимизации топливного цикла [2].

Мировая практика эксплуатации реакторов типа EPR подтверждает их высокие эксплуатационные характеристики и востребованность в современных атомных энергетических программах. Так, на АЭС «Тайшань» (Китай) функционируют два энергоблока

с реакторами французского проекта EPR-1750, которые на сегодняшний день являются самыми мощными действующими энергетическими реакторами в мире [3].

Помимо введенных в эксплуатацию блоков в Китае, строительство аналогичных реакторов продолжается на ряде зарубежных площадок. В частности, один энергоблок возводится на АЭС «Фламанвилль» во Франции, а два – на АЭС «Hinkley Point C» в Великобритании. Кроме того, в 2021 году в Финляндии был введен в промышленную эксплуатацию реактор типа EPR на энергоблоке OL3, что стало первым вводом нового энергоблока в стране за последние сорок лет. Этот энергоблок обеспечивает около 14% национального производства электроэнергии, что подчеркивает стратегическое значение технологий EPR для устойчивого развития энергетического сектора Европы [4].

Целью исследования являлась динамика параметров активной зоны EPR при работе на мощности с использованием программного комплекса MCNP6. Для достижения данной цели поставлены следующие задачи:

1. Выполнить сравнительную оценку параметров, влияющих на реактивность;
2. Оценить влияние температурных изменений на эффективность нейтронных поглотителей, в частности – растворенного бора и управляющих стержней;
3. Оценить влияние нерегулируемых (пассивных) факторов, их влияния на реактивность.

Полученные результаты могут быть использованы для обоснования проектных решений, оптимизации топливной кампании, а также в инженерных исследованиях, направленных на повышение эффективности и надежности эксплуатации ядерных энергетических установок.

В ходе исследований используется детализированная геометрическая модель реактора EPR. Можно было ограничиться сектором симметрии, не моделируя всю активную зону, но решено было учесть наличие несимметричных возмущающих систему факторов, влияющих на реактивность, и другие нейтронные функционалы. Кроме того, расчеты выполнены с использованием верифицированного кода, что позволяет сделать вывод о надежности и точности полученных результатов

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Реактор EPR (*European Pressurized Reactor*) – это современный энергетический реактор поколения III+, разработанный французской компанией *Framatome* (ранее *Areva*) и немецкой *Siemens*. Он представляет собой усовершенствованный тип *водо-водяного реактора под давлением (PWR)* с повышенными требованиями к безопасности, экономичности и длительности топливной кампании. В связи с тем, что EPR рассчитан на более длительную эксплуатацию между перезарядками топлива до 18–24 месяцев, это требует значительного начального запаса реактивности, чтобы обеспечить критичность реактора в течение всего цикла.

Ключевые факторы, которые обеспечивают высокий запас реактивности [5], а также меры по компенсации избыточной реактивности:

- благодаря высокой плотности загрузки топлива достигается высокая тепловая мощность (до 4590 МВт), что требует большого количества топлива и, соответственно, большого начального запаса реактивности;
- в EPR применяют топливо с относительно высоким обогащением урана (до 3,25% по U-235), т.е. изначально в АЗ больше делящегося материала, что приводит к избытку реактивности в начале кампании, который необходимо компенсировать;
- для контроля высокого начального запаса реактивности, в топливо добавляют *выгорающие поглотители (гадолиний Gd_2O_3 в составе топливных таблеток)*, которые постепенно высвобождают нейтроны и корректируют нейтронный баланс в активной зоне, частично компенсируя падение реактивности из-за выгорания топлива;
- в EPR применяется *химическое регулирование реактивности* с помощью борной кислоты, растворенной в воде первичного контура. В начале цикла концентрация бора высокая, и по мере выгорания топлива ее постепенно уменьшают.
- непосредственно управление реактором осуществляется с помощью *регулирующих стержней*, расположенных по всей активной зоне реактора.

В модели MCNP реактора использованы стандартные характеристики активной зоны и ТВС: 241 сборка типа 17×17, высота активной зоны 420 см, эквивалентный диаметр 376,7 см, водяной отражатель по периметру, а также топливные сборки типов А, В и С с обогащением 2,0–3,25% по U-235. В расчетах учтено до 28 твэлов с Gd_2O_3 (2–8 % масс.) в соответствии с проектными ограничениями, а также конструкция управляющих стержней на основе сплава Ag–In–Cd.

Все эксплуатационные параметры заданы в соответствии с типичными проектными характеристиками EPR: номинальная тепловая мощность 4590 МВт, давление в первом контуре около 155 бар, температура теплоносителя на входе в активную зону ~290 °С и на выходе ~330 °С, а также стандартные температурные зависимости T_{avg} и рабочий диапазон концентрации борной кислоты. Эти условия используются как граничные параметры при моделировании нейтронно-физических характеристик и выгорания топлива.

В расчетной методике использованы 2 характеристики активной зоны: реактивность ρ (и её изменение $\Delta\rho$) и концентрация борной кислоты.

Реактивность, как интегральная характеристика состояния активной зоны, может быть приближенно представлена в виде обобщенной зависимости [6]:

$$\rho = \rho(l, c, g, w_p) \quad (1)$$

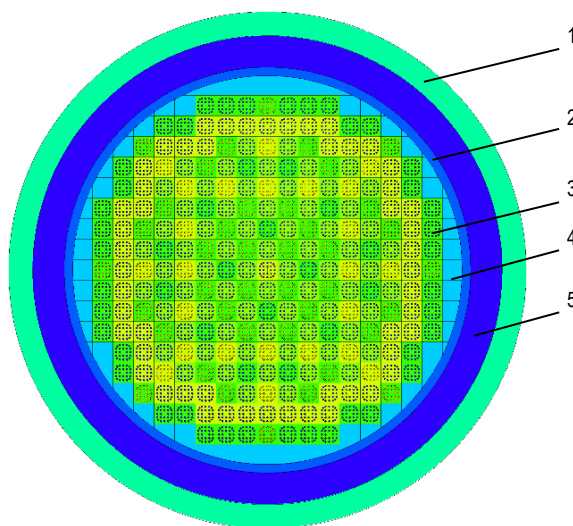
где: ρ – реактивность активной зоны; l – глубина ввода управляющих стержней; c – концентрация борной кислоты в теплоносителе; g – массовая доля гадолиния в топливе; w_p – выгорание топлива или доля накопленных продуктов деления (fission products).

Среди переменных в уравнении (1) можно выделить две принципиально разные группы. Параметры l (глубина ввода регулирующих стержней) и c (концентрация борной кислоты) напрямую регулируются в ходе оперативного управления реактором. Напротив, g (массовая доля гадолиния) и w_p (доля выгорания топлива) – это параметры, которые изменяются пассивно в ходе кампании и не регулируются в реальном времени. В таблице 1 дана сводная оценка всех 4 параметров по восьми критериям, от степени управляемости и скорости изменения до влияния на реактивность и роли в обеспечении безопасности.

Изменения таких параметров, как концентрация бора или глубина ввода стержней, оказывают значительное влияние на реактивность, особенно при первой загрузке свежего топлива. Влияние продуктов деления, таких как ксенон, имеет сложную, нелинейную динамику. Для оценки этих эффектов были выполнены расчеты с использованием метода Монте-Карло в программе MCNP [7, 8] (рисунок 1), что позволило учесть все особенности изменения реактивности в различных условиях эксплуатации. Эти процессы играют важную роль в управлении реактивностью и критичностью реактора.

Таблица 1. Сравнительная оценка параметров, влияющих на реактивность

Критерий	Управляющие стержни	Борная вода	Гадолиний	Продукты деления
Регулируемость	полностью регулируемые	регулируется концентрацией раствора	не регулируется после загрузки	не регулируются
Скорость воздействия	высокая, секунды	средняя, минуты	низкая, недели-месяцы	зависит от режима, не поддается управлению
Продолжительность действия	пока стержни находятся в активной зоне	пока поддерживается концентрация	до полного выгорания поглотителя	до распада или выгорания продуктов деления
Обратимость действия	полностью обратимо	обратно изменением концентрации	необратимо	необратимо
Механизм действия	механический ввод/вывод поглотителя	химическое изменение нейтронного поглощения теплоносителя	поглощение нейтронов в топливе	поглощение нейтронов накопившимися продуктами деления
Тип поглотителя	выгораемый, подлежит замене	растворимый в теплоносителе	выгораемый, встроенный в топливо	выгораемый, накапливаемый в топливе
Влияние на распределение мощности	локальное, по зонам	равномерное по активной зоне	локальное, вблизи таблеток с Gd	локальное, по распределению делений
Тип воздействия на реактивность	регулируемое	активное	пассивное	пассивное



1 – корпус реактора, 2 – шахта реактора, 3 – активная зона, 4 – отражатель, 5 – замедлитель

Рисунок 1. Геометрическая модель активной зоны реактора EPR

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Контроль реактивности реактора. Поглотители нейтронов

Все параметры реактора были рассчитаны при установленном температурном режиме, соответствующем номинальной мощности, что обеспечивает эффективность модели и точность анализа в условиях стабильного горячего состояния. Это состояние принято в качестве базового для дальнейших исследований.

В рамках дальнейшего анализа будет уделено некоторое внимание влиянию температурных изменений на эффективность нейтронных поглотителей, в частности – растворенного бора и управляющих стержней. Куда более интересным представляют собой динамические изменения реактивности в процессе эксплуатации реактора, особенно влияние выгорания топлива и накопление продуктов деления.

Кампания реактора начинается с загрузки свежего топлива, при этом для компенсации начального избытка реактивности используется раствор борной кислоты. В качестве рабочего ориентира принято значение 1200 ppm, характерное для PWR-типов с выгорающими добавками [9]. При полностью извлеченных регулирующих стержнях, значение k_{eff} для холодного реактора составляет 1,01918, однако с повышением температуры топливных элементов k_{eff} падает до 1,01647 при разогреве до 600 K (рисунок 2). Тем не менее, нельзя не отметить влияние повышения температуры замедлителя – максимальное влияние на повышение реактивности достигается при 550 K, а при 525 K значение k_{eff} достигает максимума 1,01921. При выходе реактора на горячее состояние k_{eff} снижается вплоть до 1,00871 ($T = 900$ K) и при критическом состоянии 1,00199 и ниже ($T > 1200$ K), что вполне соответствует прогнозируемым значениям реактивности данного типа реактора.

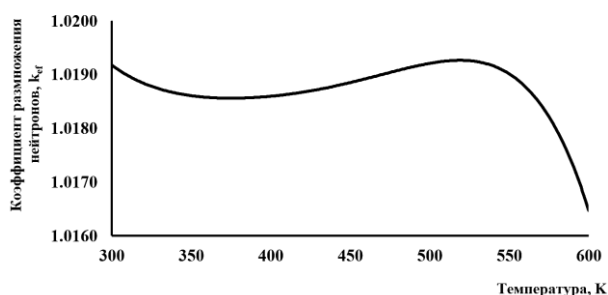
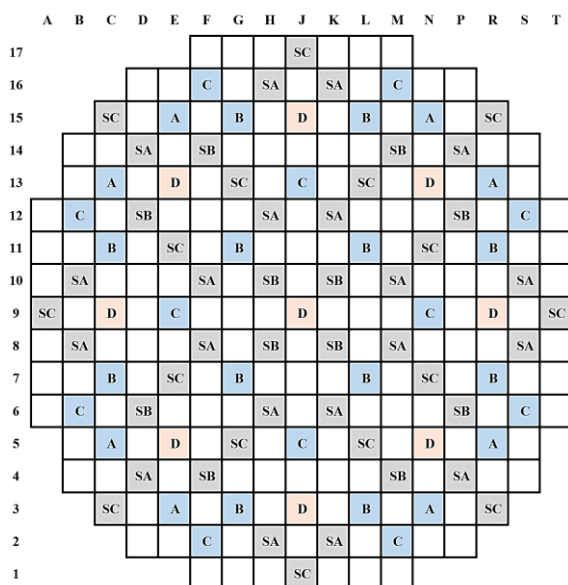


Рисунок 2. Зависимость коэффициента размножения нейтронов от температуры

Регулируемые средства управления реактивностью

Стержни управления. Рассмотренная выше, избыточная реактивность была получена без учета стержней регулирования и стержней аварийной защиты. Однако для более точного управления реактивностью и обеспечения стабильной работы реактора, особенно с учетом изменения характеристик топлива и потребностей в регулировке мощности, важно учитывать роль регулирующих стержней [10].



A, B, C, D – регулирующие стержни;
SA, SB, SC – стержни аварийной защиты

Рисунок 3. Схема расположения управляющих стержней

В действительности, в реакторе используются две группы управляющих стержней: регулирующие (A, B, C и D) и аварийные (SA, SB и SC), отличающиеся способом и целью ввода, но обе группы предназначены для контроля реактивности. Из 241 ТВС в 89 расположены управляющие стержни (по 24 шт.), при этом такие ТВС объединены в группы A B C D – регулирующие стержни и SA SB SC – стержни аварийной защиты. Группа D регулирующего типа может быть использована для специфических задач, например для контроля распределения плотности потока и/или энерговыделения в АЗ реактора.

Расчеты k_{eff} и ρ для управляющих стержней выполнены для состояния реактора, при котором тепловая мощность составляет 4590 МВт, концентрация борной кислоты в воде составляет 1200 ppm, т.е. уравнение (1) примет следующий вид:

$$\rho = \rho(l, c, t) = \rho_{c, g, t}(l_r, l_s). \quad (2)$$

Для расчета стержней регулирования стержни аварийной защиты учитываться не должны (извлечены):

$$\rho_r = \rho_{c, g, t}(l_r), \quad (3)$$

где: l_r – стержни регулирования, l_s – стержни аварийной защиты.

Стержни аварийной защиты принимаются в качестве базового средства обеспечения безопасности, предназначены для мгновенного сброса реактивности в любой момент работы реактора и зачастую не регулируются по высоте (глубине ввода). В таблице 2 отображены ключевые значения k_{eff} и изменения реактивности $\Delta\rho$, как интегральные характеристики при работе реактора на полной мощности, обеспечивающие безопасную работу, где:

$$\Delta\rho = \frac{k_2 - k_1}{k_1 k_2}. \quad (4)$$

Таблица 2. Влияние стержней аварийной защиты на реактивность

Стержни аварийной защиты	Регулировочные стержни					
	извлечены, 1200 ppm			вставлены, 1200 ppm		
	k_{eff}	$\Delta\rho$, pcm	$\Delta\rho_i$, pcm	k_{eff}	$\Delta\rho$, pcm	$\Delta\rho_i$, pcm
–	1,00199	–	–	0,95750	–	–
SA (20)	0,97560	2700	5,9	0,92365	3827	8,3
SB (12)	0,99036	1172	4,2	0,94397	1497	5,4
SC (16)	0,98985	1224	3,3	0,94517	1362	3,7
SABC (48)	0,95063	5392	4,9	0,88221	8913	8,1
Итоговое значение $\Delta\rho$	13550					

Расчеты эффективности систем управления реактивностью показали, что полный ввод всех аварийных стержней (группы SA, SB, SC) приводит к снижению эффективного коэффициента размножения на величину порядка 5400 pcm при полностью извлеченных регулирующих стержнях. В случае предварительного ввода регулирующих стержней (группы A–D), вклад аварийных стержней возрастает до 8900 pcm.

В нашем анализе система управления реактивностью обеспечивает $SDM > 5000$ pcm, что превышает минимальную подкритичность, установленную для условий работы реактора на мощности, вплоть до перегрузки топлива [11], и подтверждает высокий уровень безопасности.

Для штатного регулирования мощности используются стержни групп A–D, позволяющие плавно

управлять реактором в рабочих режимах. Ниже представлена таблица 3, где учтено влияние управляющих стержней, а на рисунке 4 представлены соответствующие значения для отдельных стержней управления.

Таблица 3. Влияние управляющих стержней на реактивность

Глубина погружения, см	Группа				
	A	B	C	D	ABCD
0	1,00202				
30	1,00165	1,00109	1,00132	1,00128	1,00050
60	1,00120	1,00039	1,00071	1,00077	0,99988
90	1,00096	1,00002	1,00017	1,00035	0,99963
120	1,00061	0,99963	0,99990	0,99999	0,99928
150	1,00035	0,99924	0,99951	0,99975	0,99887
180	1,00003	0,99874	0,99901	0,99927	0,99838
210	0,99974	0,99806	0,99843	0,99878	0,99746
240	0,99941	0,99729	0,99778	0,99818	0,99643
270	0,99892	0,99612	0,99678	0,99736	0,99477
300	0,99853	0,99459	0,99553	0,99649	0,99202
330	0,99809	0,99254	0,99406	0,99545	0,98741
360	0,99792	0,98973	0,99265	0,99444	0,97841
390	0,99766	0,98774	0,99155	0,99338	0,96211
420	0,99754	0,98714	0,99119	0,99314	0,95712

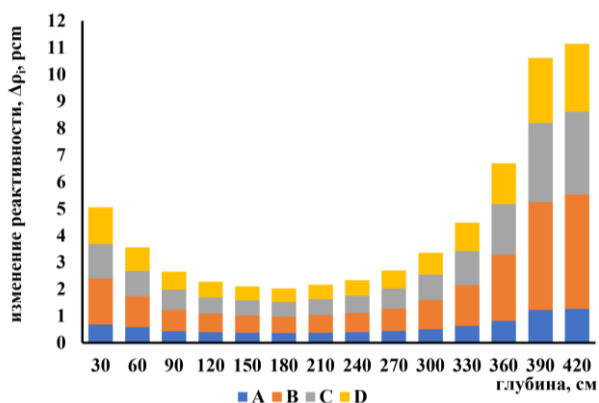


Рисунок 4. Влияние отдельных стержней управления на изменение реактивности

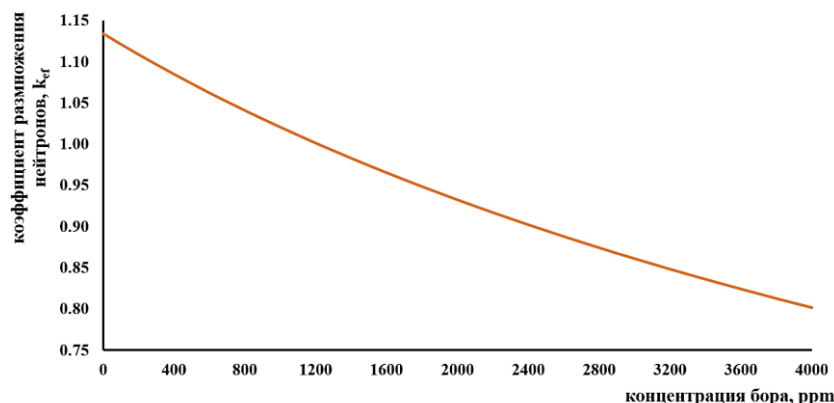


Рисунок 5. Влияние концентрации бора на реактивность

Борное регулирование. Концентрация бора определяет базовый уровень реактивности на старте кампании и последовательно снижается в процессе выгорания топлива. В отличие от стержней, бор распределен по объему и действует мягко, однако его эффективность убывает с ростом концентрации из-за насыщения нейтронного поля и сдвига спектра (рисунок 5). Несмотря на это, растворенный бор остается основным инструментом для долгосрочного регулирования и компенсации выгорания.

Для количественного анализа зависимости реактивности от борирования были вычислены значения $\Delta\rho$ и представлены в единицах pcm, такие как абсолютные значения $\Delta\rho_{abs}$ и $\Delta\rho_{rel}$ отражают величину отрицательной реактивности.

Действительно, для достижения критического состояния реактора достаточно повысить содержание бора до 1200 ppm. При таком насыщении, отрицательная реактивность $\Delta\rho$ составляет 11718, что не превышает заложенного ресурса регулирующих стержней.

Отметим, поскольку бор вводится в виде раствора в теплоносителе, т.е. в воде, его эффективность зависит от плотности воды. При повышении температуры и снижении плотности уменьшается не только замедление нейтронов, но и поглощение бора.

В дальнейшем, с точки зрения ядерной безопасности, анализ осуществляется не в терминах реактивности (ρ , $\Delta\rho$), а через концентрацию борной кислоты, что обеспечивает более удобную сопоставимость результатов и упрощает интерпретацию данных.

Нерегулируемые (пассивные) факторы влияния на реактивность

После рассмотрения внешних механизмов управления реактивностью обратимся к внутренним источникам ее изменения. Эти процессы связаны с необратимым изменением нуклидного состава топлива: выгоранием введенных поглотителей (например, гадолиния) и накоплением продуктов деления с высокими сечениями захвата.

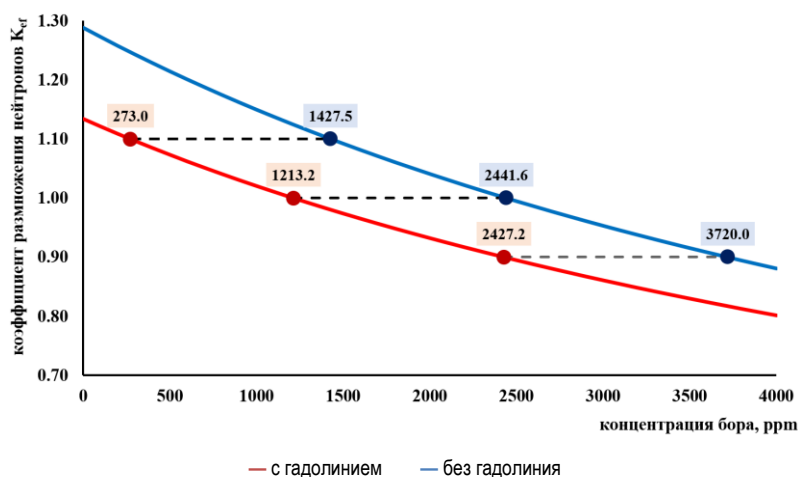


Рисунок 6. Влияние гадолиния на реактивность

Нерегулируемые поглотители нейтронов присутствуют в топливе с начала кампании либо нарабатываются в процессе его работы. К первой группе относятся заложенные изотопы, такие как гадолиний, ко второй – поглотители среди продуктов деления. Их динамика противоположна: гадолиний выгорает, уменьшая поглощение тепловых нейтронов, а продукты деления накапливаются, усиливая его. Несмотря на эти различия, их воздействие на нейтронный баланс подчиняется одному и тому же физическому механизму.

Вклад таких поглотителей в нейтронный баланс определяется их микроскопическими сечениями захвата и изменением концентрации во времени, что, в свою очередь, зависит от режима работы реактора на протяжении всей кампании. Для количественной оценки этих процессов были выполнены расчеты в MCNP, где заложенные изотопы и продукты деления учитываются в рамках одной реализации модели – через изменение макроскопических сечений поглощения в соответствующих зонах активной зоны, без разделения по происхождению нуклидов.

Дальнейшее моделирование в MCNP опирается на ранее заданный режим работы реактора. Стандартные (активные) инструменты управления, такие как стержни и бор, демонстрируют предсказуемую динамику, тогда как гадолиний и накопленные продукты деления формируют основу долгосрочной эволюции состава топлива и требуют более детального анализа.

Гадолиний. Если бор и стержни предназначены для гибкого управления реактивностью, то гадолиний, прежде всего, для компенсации избытка начальной реактивности [12, 13]. Он не регулирует реактор и его поведение по ходу кампании напрямую. Гадолиний необходим для безопасного старта кампании и корректной регулировки реактивности на ее начальном этапе (рисунок 6).

Локализация гадолиния внутри отдельных ТВЭлов и его выгорание по мере кампании делают невозможным установление простой линейной зависимости между массой гадолиния и высвобождаемой реактивностью. Его эффект изменяется во времени и определяется динамикой накопления отдельных радионуклидов, поэтому корректное аналитическое прогнозирование крайне затруднено. В практических расчетах было принято оценивать влияние гадолиния эквивалентной концентрацией борной кислоты в теплоносителе.

На основе расчетов выведено квадратичное уравнение интерполяции (5), позволяющее в дальнейшем использовать его для количественной оценки вклада гадолиния при рассмотрении продуктов деления:

$$\Delta c_k = -475k^2 + 258,5k + 1444,9. \quad (5)$$

Поскольку гадолиний вводится в топливные таблетки в виде Gd_2O_3 , распределенного по всей длине ТВЭла в отдельных ТВС, для корректного прогнозирования нейтронного баланса и радионуклидного состава и учета его нелинейного выгорания необходимо рассчитать динамику изменения масс (рисунок 7) всех его стабильных и радиоактивных изотопов [14] в течение топливной кампании.

Среди всех изотопов гадолиния наибольший вклад в поглощение тепловых нейтронов дают ^{156}Gd и ^{158}Gd . На протяжении большей части кампании их суммарный вклад составляет 100% → 91% от общего содержания гадолиния в топливе. Минимальное значение наблюдается на 10-м месяце работы и достигает 85%, что связано с разной скоростью выгорания этих изотопов по сравнению с остальными (что видно на графике выше). Заметим, что после 2-летней кампании незначительный прирост ^{155}Gd и ^{157}Gd обусловлен радиоактивным распадом ^{155}Eu и ^{157}Eu [15].

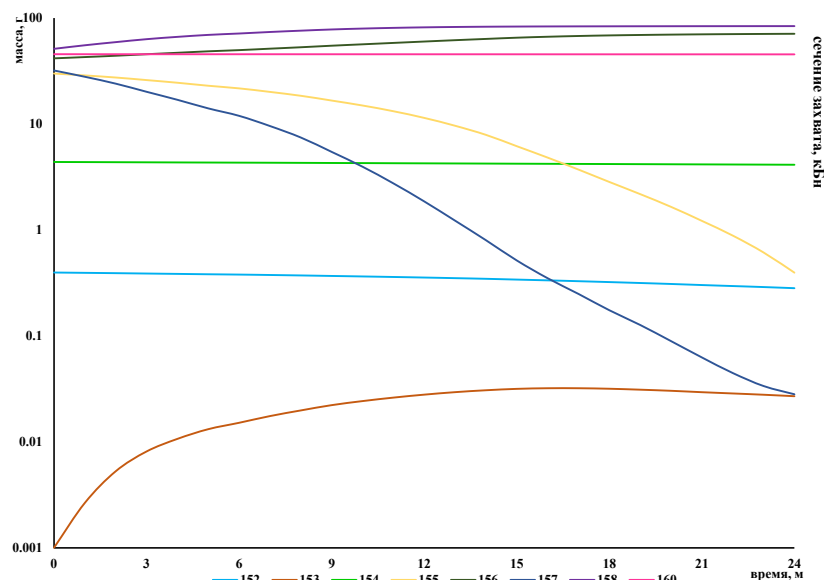


Рисунок 7. Выгорание изотопов гадолиния в активной зоне

Продукты деления. Определяющим фактором, влияющим как на снижение реактивности, так и на продолжительность топливной кампании, является процесс выгорания (деление и радиационный захват) топлива. Но т.к. в процессе выгорания происходит накопление продуктов деления (ПД), оно и определяет долговременную динамику, на фоне которой действуют все остальные средства управления. Начальные условия кампании соответствовали стандартной годовой загрузке топлива, однако моделирование выполнено на двухлетнем интервале (рисунок 8), что обеспечило реалистичную оценку долгосрочного влияния ПД.

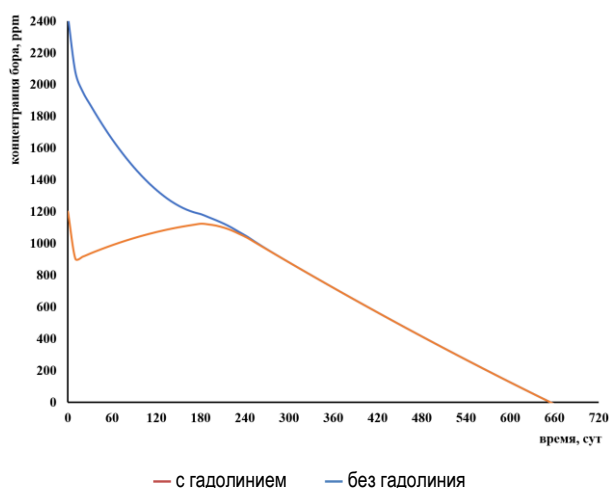


Рисунок 8. Влияние ПД на концентрацию бора

Разница между кривыми эквивалентна эффекту растворенного бора с повышением концентрации примерно на 1200 грп на начальном этапе, что позволяет напрямую сопоставить действие гадолиния с традиционными средствами управления. Спустя три месяца

его влияние снижается примерно втрое, а еще через три месяца становится сопоставимым с эффектом порядка 60 грп. Такая динамика наглядно подчеркивает критическую роль выгорающего поглотителя на ранних стадиях кампании и необходимость учета его вклада при анализе управляемости реактора.

ПД являются главным фактором долговременного снижения реактивности активной зоны. Их накопление определяет не только глубину выработки топлива, но и фактическую продолжительность кампании, накладывая прямые ограничения на эксплуатацию реактора. В отличие от активных инструментов регулирования (стержней, бора или выгорающих поглотителей), эффект ПД не поддается физическому управлению, а может быть лишь компенсирован.

С начала кампании реактивность падает практически в первые дни, к концу второй недели наблюдается значительный провал реактивности, связанный с быстрым накоплением наиболее эффективных нейтронных поглотителей среди продуктов деления. На этом этапе падение компенсируется преимущественно стержнями управления, что позволяет удерживать реактор в штатном режиме.

Далее, к шестому месяцу, динамика снижения реактивности стабилизируется и переходит в близкую к линейной зависимость. Этот тренд формирует базовый фон кампании, на котором действуют все остальные инструменты регулирования. К концу первого года запас реактивности сокращается до уровня чуть выше 600 грп. Этот момент совпадает с плановой частичной перегрузкой топлива, что наглядно подтверждает определяющую роль продуктов деления в установлении эксплуатационных границ. Одновременно становится заметным истощение части ресурса стержней, активно задействованных на начальных стадиях кампании.

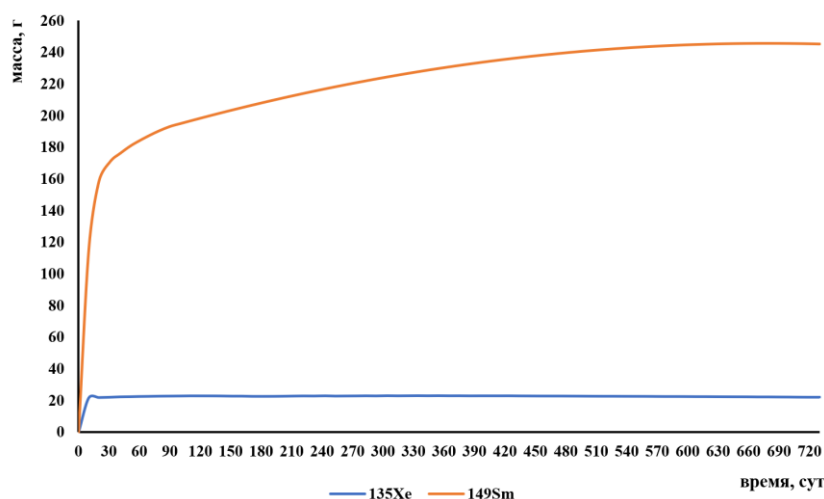


Рисунок 9. Динамика накопления основных «нейтронных поглотителей»

Таким образом, именно продукты деления задают предельные условия для длительности кампании. Они формируют долговременную динамику, на фоне которой действуют все остальные средства управления, и определяют как пределы безопасной эксплуатации, так и требования к планированию топливных загрузок. Масса образованных продуктов деления практически пропорциональна массе выгоревшего топлива и составляет $\sim 4,76$ кг/сут.

Совокупный эффект ПД определяется сравнительно узкой группой изотопов с аномально большими сечениями поглощения. Прежде всего это ^{135}Xe и ^{149}Sm [16], при выгорании порядка 4590 МВт·сут. их суммарное количество составляет около 10% от общего количества продуктов деления. Однако за счет высоких значений сечений захвата $\sigma \sim 2,6 \cdot 10^6$ барн для ^{135}Xe и $\sigma \sim 4 \cdot 10^4$ барн для ^{149}Sm , они формируют $\sim 70\%$ падения реактивности. Характерная динамика накопления показана на рисунке 9.

На представленном графике выделяются два принципиально различных участка, соответствующих действию разных нейтронных поглотителей.

^{135}Xe формирует краткосрочную фазу. Его концентрация возрастает в течение первых суток и стабилизируется на уровне, создающем заметное падение реактивности. Равновесное содержание ^{135}Xe зависит от режима мощности, при работе на номинальной мощности масса фиксируется на значении 22,5 г ко второй неделе. Именно этим объясняются как глубокое «ксеноновое дно» на ранних этапах кампании.

^{149}Sm проявляет себя на более длительных временах. Он образуется через цепочку распадов ^{149}Pm и не выгорает в заметной степени в нейтронном поле. Поэтому его концентрация растет равномернее с шестого месяца, к этому моменту влияние ^{149}Sm сопоставимо с запасом борной воды, а к концу кампании именно он становится определяющим фактором долговременного снижения реактивности.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе исследования показано, что управление реактивностью реактора EPR требует комплексного учета как регулируемых, так и пассивных факторов [10, 17]. К регулируемым параметрам относятся положение управляющих стержней и концентрация борной кислоты, которые обеспечивают оперативное и гибкое регулирование реактивности в течение топливной кампании. Пассивные факторы, включая выгорание встроенных поглотителей (гадолиния) и накопление ПД с высокими сечениями захвата нейтронов (прежде всего ^{135}Xe и ^{149}Sm), определяют долговременную динамику снижения реактивности и задают эксплуатационные ограничения по длительности кампании.

Расчеты показали, что полный ввод всех аварийных и регулирующих стержней способен снизить реактивность на 13550 pcm, что демонстрирует высокую эффективность системы управления. В частности, полный ввод только регулирующих стержней снижает реактивность на 5400 pcm, что также превышает минимальное требование по shutdown margin (≥ 5000 pcm), обеспечивая значительный запас безопасности при управлении реактором.

Борное регулирование обеспечивает плавное и равномерное управление реактивностью на протяжении всего топливного цикла. Концентрация борной кислоты в теплоносителе задает базовый уровень отрицательной реактивности, на старте кампании для компенсации избытка начальной реактивности применяется значение около 1200 ppm, что позволяет безопасно достичь критического состояния реактора при полностью извлеченных регулирующих стержнях. По мере выгорания топлива концентрация бора постепенно снижается, компенсируя падение реактивности и обеспечивая устойчивую работу реактора. Начального запаса борной кислоты хватает более чем на 20 месяцев работы, что превышает полуторный цикл перегрузки топлива.

Особое внимание уделено роли гадолиния и ПД. Гадолиний, как выгорающий поглотитель, обеспечивает компенсацию начального избытка реактивности, балансируя накопление продуктов деления, в частности ^{135}Xe и ^{149}Sm формирующих долгосрочное снижение реактивности. Учет этих эффектов является критически важным для точного прогнозирования поведения реактора и планирования топливных загрузок.

Результаты исследования подтверждают высокую эффективность комплексной системы управления реактивностью в реакторах EPR и демонстрируют необходимость интегрированного подхода к анализу нейтронно-физических характеристик активной зоны, учитывающего как активные, так и пассивные механизмы изменения реактивности.

Работа выполнена при финансовой поддержке Агентства Республики Казахстан по атомной энергии в рамках научно-технической программы BR24792713 «Развитие атомной энергетики в Республике Казахстан».

ЛИТЕРАТУРА / REFERENCES

1. U.S. EPR Fuel Assembly Mechanical Design, AREVA NP Inc., May 2013.
2. Recommendations for Addressing Axial Burnup in PWR Burnup Credit Analyses, Oak Ridge National Laboratory, MARCII 2003.
3. АЭС «Тайшань» с самыми мощными в мире реакторами EPR-1750 возобновила свою работу // Научно-деловой портал «Атомная энергия 2.0». [AES "Tayshan" s samymi moshchnymi v mire reaktorami EPR-1750 vozobnovila svoyu rabotu // Nauchno-delovoy portal "Atomnaya energiya 2.0". (In Russ.)] – URL: <https://www.atomic-energy.ru/news/2021/06/15/114775>
4. <https://leg.co.ua/stati/pervyy-v-evrope-epr-dostig-pervoy-kritichnosti.html>
5. Serge Marguet, The Physics of Nuclear Reactors. – 2017. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-59560-3>
6. Design of the Reactor Core for Nuclear Power Plants. – Vienna: International Atomic Energy Agency, 2020. – 75 p. – (IAEA Safety Standards Series; No. SSG-52).
7. MCNP – A General Monte Carlo N-Particle Transport Code. Version 5. Volume I. II. III. X-5 Monte Carlo Team. Los Alamos. New Mexico 2003.
8. D. B. Pelowitz and et. MCNP6 User's Manual. Los Alamos National Laboratory Tech. Rep. LA-CP-13-00634. Los Alamos, NM, USA. May 2013.
9. U.S. EPR FINAL SAFETY ANALYSIS REPORT. – P. 4.3.1–4.3.94.
10. Heba K. Louis, Riham M. Refeat, Mohga I. Hassan, Control rod shadowing effect in PWR core utilizing Urania-Gadolinia fuel // Progress in Nuclear Energy. – 2021. – Vol. 142. – Art. 103993. <https://doi.org/10.1016/j.pnucene.2021.103993>
11. Safety margins of operating reactors, IAEA, January 2003.
12. Structure of Nuclear Power Plant Design Characteristics in the IAEA Power Reactor Information System (PRIS) // International Atomic Energy Agency, March 2007.
13. F. Rocchi, A. Guglielmelli, S. Lo Meo, Implementation of a Cross Section Evaluation Methodology for Safety Margin Analysis: Application to Gadolinium Odd Isotopes // Report Ricerca di Sistema Elettrico, Sep 2016.
14. <https://www.ndc.jaea.go.jp/cgi-bin/Tab80WWW.cgi?iso=Gd153&lib=J40>
15. Bolukbasi Mustafa, Middleburgh Simon, Dahlfors Marcus, Lee Bill, Performance and economic assessment of enriched gadolinia burnable absorber // Progress in Nuclear Energy. <https://doi.org/10.1016/j.pnucene.2021.103752>
16. S. Dawahra, K. Khattab, G. Saba, Calculation and comparison of xenon and samarium reactivities of the HEU, LEU core in the low power research reactor // Applied Radiation and Isotopes. –2015. –Vol. 101. – P. 27–32. <https://doi.org/10.1016/j.apradiso.2015.03.015>
17. Fuel and Core Design Assessment of the EDF and AREVA UK EPR™ Reactor, Office for Nuclear Regulation An agency of HSE, 10 November 2011.

ҚҰАТТА ЖҰМЫС ІСТЕУ КЕЗІНДЕ EPR АКТИВТІ АЙМАҒЫНЫҢ ПАРАМЕТРЛЕРІНІҢ ДИНАМИКАСЫН ЗЕРТТЕУ

А. К. Мұхамедиев*, И. В. Прозорова, А. А. Прозоров, Ю. А. Попов

ҚР ҰЯО РМК «Атом энергиясы институты» филиалы», Курчатов, Қазақстан

* Байланыстар үшін E-mail: mukhamediev@nnc.kz

Жұмыстың өзектілігі EPR (European Pressurized Reactor) типті реактордың активті аймағын талдаумен және отын науқанының барлық кезеңдеріндегі реактивтілікті басқару механизмдерін сипаттаумен байланысты. Зерттеу барысында реактивтіліктің белсенді (реттелетін) параметрлерін қарастырады – басқару біліктерін енгізу тереңдігі және бор қышқылының концентрациясы, сонымен қатар пассивті – жанып кететін жұтқыштардың күйіп кетуі (гадолиний) және бөліну өнімдерінің жинақталуы. Реактивтілікке әсер ететін параметрлерді салыстырмалы бағалау жүргізілді.

Зерттеу нәтижелері EPR реакторларындағы реактивтілікті басқарудың кешенді жүйесінің жоғары тиімділігін растайды және реактивтіліктің өзгеруінің белсенді және пассивті механизмдерін ескере отырып активті аймақтың нейтрондық-физикалық сипаттамаларын талдауға интеграцияланған тәсілдің қажеттілігін көрсетеді.

Түйін сөздер: EPR реакторы, реактивтілік, жұтқыштар, бөлу өнімдері, k_{ef} , MCNP.

ANALYSIS OF CORE PARAMETER DYNAMICS IN EPR DURING POWER OPERATION

A. K. Mukhamediev*, I. V. Prozorova, A. A. Prozorov, Yu. A. Popov

Branch "Institute of Atomic Energy" RSE NNC RK, Kurchatov, Kazakhstan

** E-mail for contacts: mukhamediev@nnc.kz*

The relevance of this study is associated with the analysis of the reactor core of the EPR (European Pressurized Reactor) and the description of reactivity control mechanisms at all stages of the fuel cycle. The research considers both active (controllable) reactivity parameters such as control rod insertion depth and boric acid concentration, and passive parameters, including the burnup of burnable absorbers (gadolinium) and the accumulation of fission products. A comparative assessment of the parameters affecting reactivity has been performed.

The results of the study confirm the high efficiency of the comprehensive reactivity control system in EPRs and demonstrate the necessity of an integrated approach to the analysis of the neutronic characteristics of the reactor core, taking into account both active and passive mechanisms of reactivity change.

Keywords: *EPR reactor, reactivity, absorbers, fission products, k_{ef} , MCNP.*

СПИСОК АВТОРОВ

- Amanzhulov B. C., 20
 Amirov A., 190
 Apsezhanova A. K., 113
 Baklanov V. V., 168, 190
 Baklanova Yu. Yu., 168
 Bakranov N., 127
 Bakranova D., 127
 Buitkenov D. B., 113
 Çoruh A., 127
 Elistratov S. L., 100
 Gaipbergenova A. K., 190
 Isatov A., 20
 Ivanov I. A., 20
 Kabdrakhmanova S. K., 190
 Khazhidinov A. S., 100
 Khazhidinova A. R., 100
 Koloberdin M. V., 20
 Koyanbayev Ye. T., 190
 Magazov N. M., 113
 Miniyazov A. Zh., 190
 Mitrofanov S., 20
 Molbossynov Y. S., 113
 Mukhamedova N. M., 190
 Niaei A., 127
 Pavlov L., 20
 Pospelov V. A., 168
 Rakhadilov B. K., 113
 Sagdollin Zh., 190
 Seitov B., 127
 Shaimardan E., 190
 Skakov M. K., 190
 Skuratov V. A., 20
 Syssaletin A. V., 168
 Zdorovets M. V., 20
 Zhanbolatova G. K., 190
 Zhilkashiniva A. M., 190
 Абуова А. У., 41
 Абуова Ф. У., 41
 Агатанова А. А., 150
 Айткулов М. Т., 47, 79
 Акылбекова А. Д., 209
 Алтухов И. В., 198
 Аманжулов Б. С., 88
 Аханов А. М., 47, 79
 Ахмеди Т. Д., 209
 Ахметов Н. А., 65
 Ашибаев А. Ч., 55
 Баймолданова Л. С., 142
 Байсеит Л. Д., 178
 Бекмагамбетова Б. Е., 150
 Блынский П., 29
 Божко В. В., 107
 Бугыбай Ж. Т., 47
 Буртебаев Н., 12
 Валиолда Д. С., 198
 Верендеев С. С., 178
 Витюк Г. А., 159
 Галанина Л. И., 12
 Джансейтов Д. М., 198
 Джин Ке, 88
 Должиков С. А., 159
 Елишенков А. Б., 47, 79
 Өскербеков С. К., 47, 79
 Жанболатов О. М., 119
 Заурбекова Ж. А., 47, 79
 Зэкиева Ж. К., 41
 Злоцкий С. В., 88
 Иванов И. А., 88
 Инербаев Т. М., 41
 Иркимбеков Р. А., 5, 119, 159
 Исаев Д. А., 12
 Кажыкенов Ш. М., 198
 Какимова Г. Г., 5
 Калиев М. К., 198
 Калменов М. Э., 178
 Келсингазина Р. Е., 159
 Кенжина И. Е., 29
 Кибарин А. А., 178
 Козловский А. Л., 29
 Кривицкий П. Е., 107
 Кульсартов Т. В., 47, 79
 Қаптағай Г. А., 41
 Левченко С. П., 107
 Мерәлі Н., 41
 Миниязов А. Ж., 150
 Мухамедиев А. К., 214
 Мухамедов Н. Е., 119, 159
 Насурлла Маржан, 12
 Насурлла Маулен, 12
 Нұрпейсов А. Қ., 12
 Омирбекова А. А., 178
 Погребняк А. Д., 142
 Попов Ю. А., 214
 Прозоров А. А., 214
 Прозорова И. В., 214
 Раскалиев А., 41
 Рысқұлов А. Е., 88
 Сабыртаева А. А., 150
 Сайранбаев Д. С., 55, 79
 Сакенова Р. Е., 142
 Сакута С. Б., 12
 Сапар Ә. Д., 88
 Сарсехан Г. Г., 209
 Сатаева А. Р., 65
 Сатанова Б. М., 41
 Сахиев С. К., 12
 Секен Д. М., 119
 Серикканов А. С., 178
 Скаков М. К., 150
 Соколов И. А., 150
 Сураев А. С., 5, 119, 159
 Табынбаева А. Т., 65
 Талпакова К. А., 12
 Тастамбек К. Т., 65
 Тауанов Ж. Т., 65
 Темір Ә. М., 88
 Туленбергенов Т. Р., 150
 Турганова С. А., 12
 Углов В. В., 88
 Унгарбаев Е. О., 88
 Хаметов Ш., 29
 Ходжаев Р. А., 12
 Шаймерденов А. А., 47, 55, 79
 Шевченко Е. В., 178

ТРЕБОВАНИЯ К ОФОРМЛЕНИЮ СТАТЕЙ

Статьи для публикации в журнале отправляются авторами после регистрации на веб-сайте журнала в электронном виде в формате MS WORD (.docx).

Текст печатается **в одну колонку** на листах формата А4 (210× 297 мм) с полями: сверху 30 мм; снизу 30 мм; слева 20 мм; справа 20 мм, на принтере с высоким разрешением (600–2400 dpi). Горизонтальное расположение листов не допускается.

Используйте шрифт Times New Roman высотой 10 пунктов. Пожалуйста, используйте встроенные стили заголовков (Заголовков 1, 2...) только для названия статьи и заголовков подразделов, и не используйте их для обычного текста, таблиц и подрисовочных подписей.

В левом верхнем углу первой страницы **должен быть указан индекс УДК**. Название статьи печатается ниже заглавными буквами, в одном абзаце. После этого печатается текст краткой аннотации на языке статьи (100–3000 символов), и отдельной строкой (после фразы Ключевые слова:) – ключевые слова (5–10). Далее, со следующего абзаца – основной текст, содержащий разделы: Введение, Основную часть, Результаты (возможно, с подразделами) и Заключение. После текста статьи приводится список литературы (на языках оригиналов) и блоки «название статьи, аннотация, ключевые слова» на двух оставшихся языках.

Обратите внимание, что ФИО авторов и представляемые организации в статье указывать не нужно, т.к. статьи проходят двойное «слепое» рецензирование. **Эту информацию НЕОБХОДИМО заполнить на трех языках (русском, казахском, английском) в форме на веб-сайте журнала при подаче статьи. Рекомендуем заранее подготовить ее в виде отдельного документа с таблицами по образцу (см. ОБРАЗЕЦ на следующей странице) и приложить к статье.**

Для текста статьи используйте одинарный межстрочный интервал, между абзацами не нужно вставлять пустые абзацы и строки.

Не используйте таблицы для расположения иллюстраций и подрисовочных подписей, а также средства рисования MS Word поверх иллюстраций.

Максимально допустимый объем статьи – 10 страниц.

При написании статей необходимо придерживаться следующих требований:

- Окончательная редакция статьи, прошедшая рецензирование и допущенная к публикации, должна содержать блоки на трех языках – казахском, английском и русском, с указанием названия статьи, фамилий, имен, отчеств авторов, полного названия организаций, городов и стран местонахождения, которые они представляют, аннотации (объемом 100–3000 символов, включая знаки препинания и пробелы), и ключевых слов (5–10).
- Ссылки на литературные источники даются в тексте статьи цифрами в квадратных [...] скобках по мере упоминания. Список литературы приводится по ГОСТ 7.1-2003.
- Пожалуйста, не используйте механизм автоматической нумерации (поля) MS Word для нумерации ссылок на литературу, списков, рисунков и таблиц – используйте обычный текст;
- Иллюстрации (графики, схемы, диаграммы) должны быть выполнены на компьютере (ширина рисунка 8 или 14 см). Особое внимание обратите на надписи на рисунке – они должны быть различимы при уменьшении до указанных выше размеров. Файлы рисунков должны быть представлены отдельно в одном из растровых – .tif, .png (для схем и рисунков с надписями), .jpg (для фото) с разрешением 300 dpi (~1000 px для рисунков шириной 8 см и ~1800 px для рисунков шириной 14 см) или векторных – .svg, .wmf, .emf форматах. Названия файлов должны соответствовать положению в статье (напр. Рисунок 1-a.tif). Для надписей на рисунках предпочтительно использовать шрифт Arial Narrow или аналогичный (узкий шрифт без засечек).
- Математические формулы в тексте должны быть набраны как уравнения MS Word или формулы MathType. Следует нумеровать лишь те формулы, на которые имеются ссылки в тексте.
- Текст должен быть тщательным образом выверен и отредактирован. Бумажная версия статьи должна быть в конце подписана авторами.

К статье прилагаются следующие документы:

- 1) *Сопроводительное письмо от авторов*, в котором должны содержаться сведения о том, что статья может быть опубликована в открытой печати, ранее не была опубликована, не находится на рассмотрении на предмет публикации в других изданиях, статья не содержит информации, способной привести к конфликту интересов.
- 2) *Файлы рисунков*.

Название статьи, аннотация, ключевые слова, а также сведения обо всех авторах статьи и представляемых организациях заполняются **на 3-х языках (русском, казахском, английском) в форме на сайте при подаче статьи** (эту информацию также желательно приложить к статье в виде отдельного файла – см. ОБРАЗЕЦ на следующей странице).

Дополнительную актуальную информацию по оформлению, подготовке статей, авторским правам, регистрации можно получить на веб-сайте журнала в разделе **Правила для авторов** (<https://journals.nnc.kz/jour/about/submissions>).

Статьи, оформление которых не соответствует указанным требованиям, к публикации не допускаются.

ОБРАЗЕЦ

Название статьи (на русском языке)

Таблица 1. Авторы (на русском языке)

Порядковый номер автора статьи	Фамилия	Имя полностью	Отчество полностью (если имеется)	Должность	Ученая степень	Телефон (без скобок, пробелов и дефисов)	Электронная почта	Номера организаций, которые представляет автор (из таблицы 2)
1	Иванов	Иван	Иванович	доцент	PhD	+57771114455	my_mail@mail.ru	1, 2
2	Петров	Петр	Петрович	зав. лаб.	к.ф.-м.н.	+69992223366	my_mail@google.com	1

Таблица 2. Организации (на русском языке)

Порядковый номер организации	Наименование	Полный почтовый адрес (индекс, страна, город, улица, дом)	Официальный веб-сайт (если имеется)
1	Евразийский национальный университет им. Л. Н. Гумилева	010008, Республика Казахстан, г. Нур-Султан, ул. Сатпаева, 2	www.enu.kz
2	Астанинский филиал Института ядерной физики МЭ РК	010008, Республика Казахстан, г. Нур-Султан, пр. Абылай хана, 2/1	www.inp.kz

Название статьи (на казахском языке)

Таблица 1. Авторы (на казахском языке)

Мақала авторының реттік нөмірі	Тегі	Толық аты	Әкесінің толық аты (болса)	Лауазымы	Ғылыми дәрежесі	Телефоны (жақшасыз, бос орынсыз және дефиссіз)	Электрондық поштасы	Автор ұйымдарының нөмірлері (2-кестеден)
1	Иванов	Иван	Иванович	доцент	PhD	+57771114455	my_mail@mail.ru	1, 2
2	Петров	Петр	Петрович	зертхана меңгерушісі	ф.-м.ғ.к.	+69992223366	my_mail@google.com	1

Таблица 2. Организации (на казахском языке)

Ұйымның реттік нөмірі	Атауы	Толық пошталық мекенжайы (индекс, ел, қала, көше, үй)	Ресми веб-сайт (болса)
1	Л. Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті	010008, Қазақстан Республикасы, Нұр-Сұлтан қ., Сәтпаев көшесі, 2	www.enu.kz
2	ҚР ЭМ Ядролық физика институтының Астана филиалы	010008, Қазақстан Республикасы, Нұр-Сұлтан қ., Абылай хан даңғылы, 2/1	www.inp.kz

Название статьи (на английском языке)

Таблица 1. Авторы (на английском языке)

Order number of author's article	Surname	Full Name	Full Middle Name (if any)	Position	Academic degree	Telephone (free of brackets, gaps and hyphens)	E-mail	Numbers of organizations representing by author (from Table 2)
1	Ivanov	Ivan	Ivanovich	Associate professor	PhD	+57771114455	my_mail@mail.ru	1, 2
2	Petrov	Peter	Petrovich	Chief of laboratory	Cand. of Phys. and Math. Sc.	+69992223366	my_mail@google.com	1

Таблица 2. Организации (на английском языке)

Order number of organization	Title	Full post address (zip code, country, city, street, house)	Official web-site (if any)
1	L.N. Eurasian National University	010008, Republic of Kazakhstan, Nur-Sultan, Satpaev st. 2	www.enu.kz
2	Astana Branch of the Institute of Nuclear Physics ME RK	010008, Republic of Kazakhstan, Nur-Sultan, ave. Abylai Khan, 2/1	www.inp.kz

Примечание: если информация отсутствует – оставляйте соответствующие ячейки таблицы пустыми.

Ответственный секретарь к.ф.-м.н. В.А. Витюк
тел. +7 (722-51) 3-33-35, E-mail: VITYUK@NNC.KZ

Технический редактор И.Г. Перепелкин
тел. +7 (722-51) 3-33-33, E-mail: IGOR@NNC.KZ

Адрес редакции: 180010, Казахстан, г. Курчатов, ул. Бейбіт атом, 2Б
<https://journals.nnc.kz/jour>

© Редакция журнала «Вестник НЯЦ РК», 2025

Свидетельство о постановке на учет №17039-Ж от 13.04.2018 г.
Выдано Комитетом информации Министерства информации и коммуникаций Республики Казахстан

Тираж 300 экз.

Выпуск набран и отпечатан в типографии
Национального ядерного центра Республики Казахстан
071100, Казахстан, г. Курчатов, ул. Бейбіт атом, 2Б



