

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ВЫГОРАНИЯ, ГЕНЕРАЦИИ И ВЫДЕЛЕНИЯ ТРИТИЯ В УСЛОВИЯХ РЕАКТОРНОГО ОБЛУЧЕНИЯ

И.Н. Бекман*, И.Л. Тажибаева, А.А. Куйкабаева, И.М. Бунцева*

Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы,

**Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова, Москва*

В работе приведено математическое моделирование процессов выгорания, генерации и выделения трития из облученных образцов литиевой керамики. Показано, что метатитанат лития наиболее перспективен для их применения в зонах воспроизводства трития в бланкетах термоядерных реакторов.

Введение

Целью настоящей работы является оценка перспектив использования титаната лития, обогащенного по изотопу ${}^6\text{Li}$, в качестве бридерного материала для установок управляемого термоядерного синтеза. В качестве исследуемого материала использовали метатитанат лития (как чистый, так и допированный оксидом титана), обогащенный до 96% по изотопу литий-6 [1]. Удалось изучить процессы выделения трития из керамики на базе высокообогащенного по литию-6 титаната лития в режиме реакторного эксперимента (на реакторе ВВР-К) при термоциклировании образца, причем до весьма высоких степеней выгорания исходного компонента ядерной реакции (${}^6\text{Li}$) [2]. В результате удалось выяснить механизмы, ответственные за выделение трития, получить количественную оценку диффузионных параметров, определить особенности влияния термоциклирования и облучения материала в мощных полях нейтронного, рентгеновского и ультрафиолетового излучений на устойчивость процесса извлечения трития из бридерного материала [3].

В данной работе приведено математическое моделирование процессов выгорания, генерации и выделения трития из облученных образцов литиевой керамики.

1. Выгорание лития – 6 и генерация трития

1.1. Выгорание

Дифференциальное уравнение, описывающее изменение числа атомов лития-6 (N_1) во времени имеет вид:

$$\frac{dN_1(t)}{dt} = -\Phi \sigma N_1(t), \quad (1)$$

Φ – поток нейтронов, прошедших через слой вещества (например, титаната лития) толщиной L , $\text{см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$; σ – среднее сечение взаимодействия нейтронов с веществом, см^2 ; $N_1(t)$ – функция, описывающая изменение числа атомов лития-6 во времени; t – время (с).

Интегрируя уравнение (1), получим:

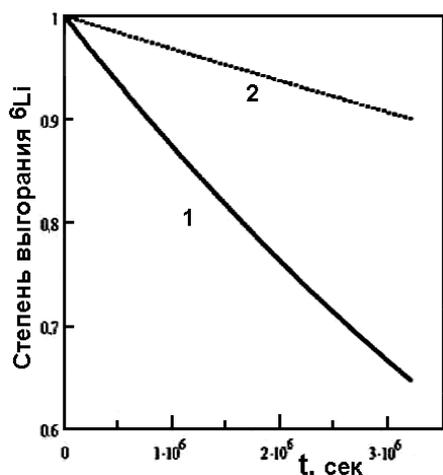
$$N_1(t) = N_{10} e^{-\Phi \sigma t}, \quad (2)$$

где N_{10} – число атомов лития-6 в образце (ампуле) Li_2TiO_3 в начальный момент времени, $k = \Phi \sigma$.

Плотности потоков тепловых нейтронов в каналах реактора ВВР-К варьируются в зависимости от типа канала (центральный канал и боковые каналы активной зоны) и длительности кампании реактора, изменяясь в пределах $(1,1 \div 1,4) \cdot 10^{14}$ нейтрон/ $(\text{см}^2 \cdot \text{сек})$. Другой важный параметр, входящий в уравнение (2) – сечение ядерной реакции. Сечения взаимодействия тепловых нейтронов с атомом ${}^6\text{Li}$ равна $\sigma = 970$ барн. В условиях нашего реального реакторного эксперимента на ВВР-К энергетический спектр нейтронов, поступающих на образец, изменяется от тепловых энергий до 5-6 МэВ и имеет сложную структуру. Сделанные нами оценки показывают, что здесь более обосновано принятие за величину среднего эффек-

тивного сечения реакции ${}^6\text{Li}(n,\alpha)\text{T}$ значение $\sigma=300$ барн.

Нами были проведены оценки минимальной и максимальной степеней выгорания лития-6 в ходе всего реакторного облучения.



Минимальная ожидаемая степень выгорания лития-6 равна 10%, а максимальная - 35%. Экспериментальное значение 23% (остаточная концентрация лития-6 - 77%) разумно укладывается в этот интервал. Кинетика уменьшения концентрации лития в титанате лития в условиях при $\sigma=970$ барн и $\sigma=300$ барн режимов выгорания приведены на рис.1.

Рис.1. Ожидаемое изменение концентрации лития-6 в титанате лития при $\sigma=970$ барн (кривая 1) и $\sigma=300$ барн (кривая 2) режимах облучения

1.2. Генерация и распад трития

В принципе, кинетика накопления трития в образце (при отсутствии выделения) определяется кинетикой выгорания лития-6. Однако следует учитывать, что тритий – радиоактивный изотоп (период полураспада 12,6 лет), что может сказаться на кинетике его накопления (Следует учитывать, что за год распадается 5,47% начального количества трития).

Кинетика изменения концентрации трития, нарабатываемого из лития-6 в гранулах керамики (при условии отсутствия миграции трития из образца), описывается дифференциальным уравнением:

$$\frac{dN_2(t)}{dt} = \Phi \sigma N_1(t) - \lambda_2 N_2(t) \quad (3)$$

где N_2 – число атомов трития, образовавшегося из лития-6, $\lambda = 0,0000025 \text{ c}^{-1}$ - постоянная распада трития. Взаимодействием нейтронов с тритием мы здесь пренебрегли.

Число атомов трития (при длительном облучении, с учётом его распада), образовавшихся в образце в ходе ядерной реакции, продолжавшейся время t :

$$N_2(t) = \frac{\Phi \sigma}{\lambda_2 - \Phi \sigma} N_{10} (e^{-\Phi \sigma t} - e^{-\lambda_2 t}) + N_{20} e^{-\lambda_2 t} \quad (4)$$

Здесь N_{10} и N_{20} - значения N_1 и N_2 при $t=0$. N_{20} - число атомов трития после i -ой кампании (перед $i+1$ - кампанией); N_{10} - число атомов лития в начальный момент времени.

Если пренебречь распадом трития, то весь прореагировавший литий-6 переходит в тритий (при $t \rightarrow \infty$, $N_2 = N_{10}$) по уравнению:

$$N_2 = N_{10} (1 - e^{-\Phi \sigma t}) \quad (5)$$

При малых временах концентрация трития возрастает линейно:

$$N_2 = \Phi \sigma t \quad (6)$$

При $t \rightarrow \infty$ $N_2 = N_{10}$.

Расчёты показали, что радиоактивный распад трития за 5350 час, приводит к уменьшению его концентрации примерно на 3%. В дальнейшем, распад трития мы обычно не учитывали.

Отметим, что при расчёте выхода трития в ходе ядерной реакции, следует учесть падение потока нейтронов при прохождении слоя образца. Даже при однородном распределении лития, концентрация образовавшегося трития будет падать при движении от поверхности к центру сферы. Проиллюстрируем сказанное на примере плоской геометрии. Число атомов радиоактивного элемента N_2 , образующихся в образце в единицу времени [c^{-1}], равно изме-

нению потока нейтронов, прошедших через вещество. Ослабление потока частиц в 1 см^2 вещества может быть найдено решением дифференциального уравнения:

$$\frac{d\Phi}{dl} = \Phi \sigma N_1 \quad (7)$$

где; L - толщина слоя материала, см; N_1 - число атомов активируемого изотопа ${}^6\text{Li}$ в 1 см^3 образца [см^{-3}]. Отсюда

$$\Phi = \Phi_0 e^{-\sigma N_1 L} \quad (8)$$

и скорость образования атомов трития

$$N_2 = (\Phi_0 - \Phi) S \eta = \Phi_0 S \eta (1 - e^{-\sigma N_1 L}), \quad (9)$$

где Φ_0 – первоначальный поток нейтронов, $\text{см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$, S – площадь поверхности образца [см^2], η - доля нейтронов, расходуемых непосредственно на образование трития.

Для малых образцов при малых σ , т.е. при условии небольшого изменения потока нейтронов, после разложения в ряд члена $e^{-\sigma N_1 L}$ можно ограничиться двумя первыми членами разложения. Имеем для числа атомов трития, образующихся за секунду:

$$N_2 = \Phi \sigma L S \eta N_1 \text{ [атом/с]}. \quad (10)$$

В дальнейшем, в качестве первого приближения мы будем пользоваться именно этим выражением.

2. Выделение трития из сферической гранулы за счет отдачи

В ${}^6\text{Li}(n,\alpha)\text{T}$ – реакции выделяющаяся энергия распределяется между атомами гелия и трития. Расчеты пробегов атомов отдачи трития в титанате лития и в атмосфере гелия проводили при следующих значениях параметров: масса трития 3.008 а.е., энергия отдачи трития – 3 МэВ, плотность образца из Li_2TiO_3 равна 2.8700 г/см^3 или $9.4454 \cdot 10^{22} \text{ атом/см}^3$.

Для энергии 3 МэВ пробег атомов отдачи трития в титанате лития составил 84 микрона ($0,0084 \text{ см}$), при этом электронная составляющая удельной потери энергии $dE/dx = 0,786 \text{ МэВ/(мг/см}^2)$, ядерная составляющая удельной потери энергии $dE/dx = 1,424 \cdot 10^{-4} \text{ МэВ/(мг/см}^2)$, продольное рассеяние узкого пучка 3,4 мкм, боковое рассеяние 3 мкм. Поскольку диаметр использованных в работе гранул был равен 1 мм, то эффект отдачи не затрагивал центральную область гранулы, однако приповерхностный слой гранулы должен быть сильно обеднён тритием, что должно сказаться на интенсивности газовой выделения, осуществляемого за счёт диффузии.

Расчёты пробегов атомов отдачи трития в газообразном гелии проводили для плотности мишени $1,8000 \cdot 10^{-4} \text{ г/см}^3$ ($2.7079 \cdot 10^{19} \text{ атом/см}^3$.) Результаты счета: электронная составляющая удельной потери энергии $dE/dx = 0,2807 \text{ МэВ/(мг/см}^2)$, ядерная составляющая удельной потери энергии $dE/dx = 1,880 \cdot 10^{-4} \text{ МэВ/(мг/см}^2)$, пробег 363,64 мм (36 см), продольное рассеяние узкого пучка 14,06 мм, боковое рассеяние 4,78 мм.

2.1. Поток атомов отдачи трития из сферической гранулы

Рассмотрим особенности эффекта отдачи в сферической грануле [6].

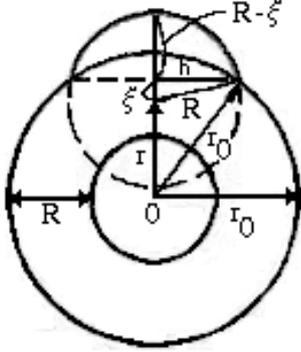
Введём обозначения: C_{Li} и C_{T} концентрации лития и трития, соответственно [$\text{атом} \cdot \text{см}^{-3}$], λ - постоянная распада трития [с^{-1}], r_0 - радиус зерна сферической формы [см] и R_t - пробег отдачи трития в исследуемом материале [см]. Литий равномерно распределён по объёму зерна. Тритий образуется сразу во всём объёме зерна по реакции ${}^6\text{Li}(n,\alpha){}^3\text{H}$. Φ – скорость генерации нейтронов в объёме материала [$\text{нейтр} \cdot \text{см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$]. σ - эффективное сечение реакции взаимодействия нейтронов с литием [см^2], S – площадь поверхности [см^2] (площадь геометрической поверхности сферы $S = 4\pi r_0^2$), η - вероятность протекания ядерной реакции по конкретному каналу (в основном определяется долей изотопа ${}^6\text{Li}$ в смеси изотопов лития).

Распределение концентрации трития по толщине сферы определяется решением диф-

дифференциального уравнения:

$$\frac{\partial C_T(t)}{\partial t} = \Lambda C_{Li}(t)[1 - q(r)] - \lambda C_T(t), \quad (11)$$

где $q(r)$ - вероятность вылета, из зерна за счет эффекта отдачи атома трития, образовавшегося в точке с координатой r , а $\Lambda = \Phi \sigma_{Li} S \eta N$; Λ - постоянная скорости образования трития.



Из геометрических соображений очевидно (рис. 2), что $q(r)$ равна отношению площади поверхности сферического сегмента высотой $R_t - \Delta$, расположенного вне сферического зерна, к общей поверхности сферы радиуса r_0 :

$$q(r) = \frac{2\pi(R_t - \xi)R_t}{4\pi R_t^2} = \frac{R_t - \xi}{2R_t}. \quad (12)$$

R_t - пробег атомов отдачи трития в Li_2TiO_3 ; r - координата точки рождения трития в сферической грануле; (ξ и h - см. рисунок 2).

Рис.2. Модель сферического зерна

Поскольку
$$\begin{cases} (r + \xi)^2 + h^2 = r_0^2 \\ \xi^2 + h^2 = R_t^2 \end{cases}, \text{ то } \xi = \frac{r_0^2 - R_t^2 - r^2}{2r}. \quad (13)$$

Таким образом, в приповерхностном слое зерна (слой 1), $r_0 - R_t \leq r \leq r_0$:

$$q(r) = \frac{2R_t r - (r_0^2 - R_t^2) + r^2}{4R_t r} \quad (14a)$$

в объеме зерна (слой №2) $0 \leq r \leq r_0 - R_t$:

$$q(r) = 0 \quad (14b)$$

Решение уравнения (11) описывает изменение во времени концентрации трития:

$$C_T(t) = \frac{\Lambda}{\lambda - \Lambda} C_{Li}^0 [1 - q(r)] (e^{-\Lambda t} - e^{-\lambda t}) + C_T^0 e^{-\lambda t} \quad (15)$$

где C_{Li}^0 - начальная концентрация трития.

При достаточно больших временах член $\exp(-\lambda t)$ делается пренебрежимо малым по сравнению с $\exp(-\Lambda t)$, и если в начальный момент трития в образце не было, то выражение (15) можно упростить:

$$C_T(t) = \frac{\Lambda}{\lambda - \Lambda} [1 - q(r)] C_{Li}^0 e^{-\Lambda t} \quad (16a)$$

и так как $C_{Li}^0 e^{-\Lambda t} = C_{Li}$ и $\lambda \gg \Lambda$, то

$$C_T(r, \infty) = \frac{\Lambda C_{Li}}{\lambda} [1 - q(r)] \quad (16b)$$

Концентрация трития (при равновесии) - равна Λ/λ - отношение скорости образования к скорости распада трития.

Влияние величины пробега атомов отдачи трития на форму концентрационного профиля трития, образовавшегося из лития в грануле сферической формы. (Модельный пример, рассчитанный при значения параметров $R_t = 5 \cdot 10^{-6}$ (1) и $1 \cdot 10^{-6}$ (2) см).

В стационарном состоянии, распределение концентрации трития по радиусу сферы в тонком приповерхностном слое толщиной R_t , обедненным тритием за счёт эффекта отдачи:

$$C_T(r) = \frac{\Lambda C_{Li}}{\lambda} \left\{ \frac{1}{2} + \frac{r_0^2 - R_t^2}{4R_t r} - \frac{1}{4} \frac{r}{R_t} \right\}; \quad r_0 - R_t \leq r \leq r_0. \quad (17a)$$

Концентрационный профиль трития в центральной зоне сферы

$$C_T(r) = \frac{\Lambda C_{Li}}{\lambda}; \quad 0 \leq r \leq r_0 - R_t. \quad (176)$$

Общее число атомов трития, генерируемых в сфере радиуса r_0 в единицу времени

$$G = \frac{4}{3} \pi r_0^3 C_{Li} \Lambda. \quad (18)$$

Общее число атомов трития, выделяющихся из зерна в единицу времени за счет эффекта отдачи (поток) в стационарном состоянии (при наличии равновесия между скоростью генерации трития и скоростью его выделения за счёт отдачи):

$$J_R = C_{Li} \Lambda 4\pi \int_{r_0 - R_t}^{r_0} q(r) r^2 dr \quad (19)$$

Взяв интеграл, получим выражение для стационарного потока атомов отдачи трития из сферы:

$$J_R = \pi \Lambda C_{Li} \left(r_0^2 R_t - \frac{1}{12} R_t^3 \right) \quad (20)$$

Нормированный на скорость образования, поток атомов отдачи трития:

$$J_R^* = \frac{J_R}{G} = \frac{3 R_t}{4 r_0} - \frac{1}{16} \left(\frac{R_t}{r_0} \right)^3 \quad (21)$$

Функция J_R^* изменяется от 0 до 1.

Зависимость нормированного на мощность источника потока атомов отдачи трития из сферы от размера гранулы (при постоянном пробеге отдачи трития $R=0,0084$ см) представлена на рисунке 3, а от пробега атомов отдачи (при постоянном радиусе гранулы $r_0=0,1$ см) – на рисунке 4.

Если пробег трития мал $R_t \ll r_0$ (для $J_R^* < 35\%$), то:

$$J_R^* \approx \frac{3 R_t}{4 r_0} \quad (21a)$$

При $r \leq 0.5 R_t$, $J_R^* = 1$.

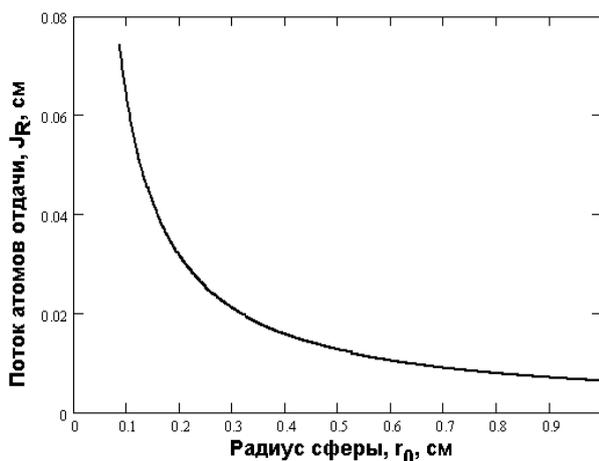


Рис.3. Зависимость нормированного потока атомов отдачи трития из сферы от размера гранулы

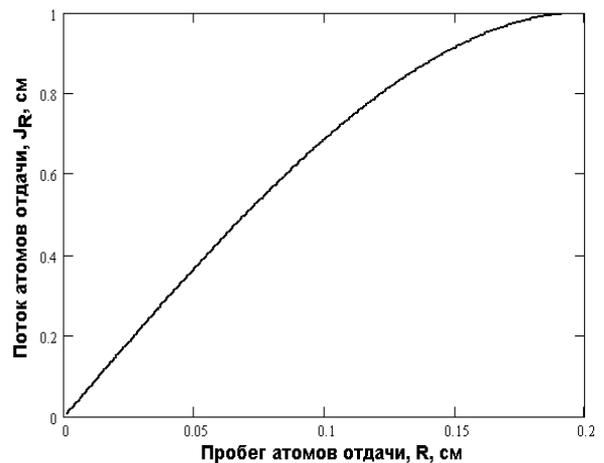


Рис.4. Зависимость нормированного потока атомов отдачи трития из сферы от пробега атомов отдачи в материале гранулы

2.2. Учёт одновременной потери трития за счёт энергии отдачи и за счёт ухода трития в НТО

Учтём теперь потерю трития при его переходе в НТО.

Тритий теряется не только за счёт эффекта отдачи. Он способен вступать в радиационно-химическую реакцию с кислородом, содержащимся в молекуле соли, с кислородом воды, или обмениваться с протием, входящим в состав иона ОН или в обычную воду (Вода и гидроксиды всегда присутствуют в солях). Введём константу скорости химических процессов, уводящих тритий в НТО, k_x [с^{-1}].

Тогда дифференциальное уравнения, описывающее изменение во времени концентрационного профиля трития в объёме сферы, с учётом ухода трития за счёт эффекта отдачи и за счёт образования НТО, можно записать в виде:

$$\frac{dC_T(r,t)}{dt} = \Lambda C_{Li}(r,t) - \Lambda q(r) C_{Li}(r,t) - \lambda C_T(r,t) - k_x C_T(r,t) \quad (22a)$$

или

$$\frac{dC_T(r,t)}{dt} = \Lambda(1 - q(r)) C_{Li}(r,t) - (k_x + \lambda) C_T(r,t) \quad (22б)$$

или

$$\frac{dC_T(r,t)}{dt} = \Lambda_1 C_{Li}(r,t) - \Lambda_2 C_T(r,t) \quad (22в)$$

где $\Lambda_1 = \Lambda(1 - q(r))$, $\Lambda_2 = k_x + \lambda$.

Решения подобных дифференциальных уравнений в частных производных мы в дальнейшем будем использовать для описания кинетики дегазации сферы при наличии источника (непрерывная генерация трития) и стока (радиоактивный распада, захват дефектами, химическая реакция трития кислородом, изотопный обмен).

3. Выделение трития за счет диффузии

Рассмотрим теперь выделение трития за счёт диффузии (с учётом обеднения приповерхностного слоя за счёт отдачи) и за счёт отдачи при постоянной температуре. Описание диффузионного выделения трития из гранулы сферической формы начнём с простой модели. Будем полагать, что тритий равномерно генерируется по объёму сферы. Коэффициент диффузии трития считаем постоянным (не зависящим от координаты, времени и концентрации трития). Сопротивлением диффузии, связанным с реакцией молизации трития на выходной границе сферы также пренебрегаем. Считаем, что миграция трития по материалу не осложнена какими-либо процессами взаимодействия трития с окружающей средой. Будем решать задачу дегазации сферы в рамках классического механизма диффузии (т.е. подчиняющегося законам диффузии Фика и закону растворимости Генри), с учётом наличия источников (генерация за счёт ядерной реакции) и стоков (радиоактивный распад трития), при граничных условиях 1-го рода.

При использовании 2-го закона Фика для решения задачи выделения трития из твёрдого тела за счёт диффузии следует учитывать наличие нескольких осложняющих обстоятельств:

- 1) Образование трития в ходе ядерной реакции (наличие источника);
- 2) Радиоактивный распад трития (сток);
- 3) Обеднение приповерхностного слоя (толщина которого равна пробегу отдачи) образца за счёт эффекта отдачи (отдача эффективно уносит тритий из приповерхностного слоя).

Коротко остановимся на некоторых примерах. Рассмотрим процесс выделения трития из сферы радиуса r_0 за счёт диффузии при наличии эффекта отдачи. Задачу будем решать в рамках модели классической диффузии при граничных условиях 1-го рода. Стадию образования молекул трития из атомов считаем не лимитирующей.

В соответствии с 1-ым законом Фика, поток молекул трития, выходящих из шара за счёт диффузии:

$$J_D = -D4\pi r_0^2 \left(\frac{dC_T}{dr} \right)_{r=r_0} \quad (23)$$

где D – коэффициент диффузии трития, $\left(\frac{dC_T}{dr} \right)_{r=r_0}$ – градиент концентрации трития в приповерхностном слое сферы.

Скорость образования трития: $G = \frac{4}{3}\pi r_0^3 C_{Li} \Lambda$

Нормированный на скорость генерации, диффузионный поток трития из сферы:

$$J_D^* = \frac{J_D}{G} = -\frac{3D}{C_{Li}\Lambda r_0} \left(\frac{dC_{Li}}{dr} \right)_{r=r_0} \quad (24)$$

Распределение концентрации трития $C(r)$ найдём из решения дифференциального уравнения 2-го закона Фика для сферы:

$$\frac{\partial C_T}{\partial t} = \frac{D}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial C_T}{\partial r} \right) + \Lambda C_{Li} - \lambda C_T - \Lambda C_{Li} q(R_t) \quad (25)$$

где доля атомов, выделяющихся за счёт отдачи:

$$q(r) = \begin{cases} \frac{2R_t r - (r_0^2 - R_t^2) + r^2}{4R_t r}; & r_0 - R_t \leq r \leq r_0 \\ 0; & 0 \leq r \leq r_0 - R_t \end{cases} \quad (26)$$

В этой статье мы ограничимся стационарным состоянием диффузии (т.е. когда скорости генерирования и стока трития уравновешены, так что концентрационный профиль трития не изменяется во времени). В стационарном состоянии диффузии $\frac{\partial C_2}{\partial t} = 0$ и для нахождения функции $C_{2\infty}(x)$ необходимо решить уравнение:

$$\frac{D}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial C_T}{\partial r} \right) + \Lambda C_{Li} - \lambda C_T - \Lambda C_{Li} q(r) = 0 \quad (27)$$

при граничных условиях:

$$C_T(r_0 - R_t \leq r \leq r_0)_{t=0} = 0; \quad C_T(r_0 - R_t \leq r \leq r_0)_{t=0-R_t} = C_T(0 \leq r \leq r_0 - R_t)_{t=0-R_t} \quad (28a)$$

$$\left. \frac{\partial C_T}{\partial r} (0 \leq r \leq r_0 - R_t) \right|_{r=0} = 0; \quad \left. \frac{\partial C_T}{\partial r} (r_0 - R_t \leq r \leq r_0) \right|_{r=r_0 - R_t} = \left. \frac{\partial C_T}{\partial r} (0 \leq r \leq r_0 - R_t) \right|_{r=r_0 - R_t} \quad (28b)$$

Распределение концентрации в приповерхностном слое, $r_0 - R_t \leq r \leq r_0$.

$$C_T = \frac{\Lambda C_{Li}}{4\lambda R_t} \left\{ \frac{r_0^2 - R_t^2}{r} - \frac{2D}{\lambda r} + 2R_t - r \right\} + \frac{a_1}{r} Sh \sqrt{\frac{\lambda}{D}} r + \frac{a_2}{r} Ch \sqrt{\frac{\lambda}{D}} r \quad (29a)$$

Распределение концентрации во внутренней области, $0 \leq r \leq r_0 - R_t$.

$$C_T = \frac{\Lambda C_{Li}}{\lambda} - \frac{a_0}{r} Sh \sqrt{\frac{\lambda}{D}} r \quad (29b)$$

Константы a_0 , a_1 и a_2 найдем из граничных условий (28a), которые можно свести к системе уравнений:

$$a_1 Shar_0 + a_2 Char_0 = \frac{\Lambda C_1}{4\lambda R} \left(\frac{2D}{\lambda} - 2R_t r_0 + R_t^2 \right); \quad (30a)$$

$$a_0 Sha(r_0 - R_t) + a_1 Sha(r_0 - R_t) + a_2 Cha(r_0 - R_t) = \frac{\Lambda C_1}{\lambda} (r_0 - R_t) - \frac{\Lambda C_1}{4\lambda R_t} \left(4R_t r_0 - 2R_t^2 - \frac{2D}{\lambda} \right) \quad (30б)$$

$$a_0 \left[Sha(r_0 - R_t) - (r_0 - R_t) a Cha(r_0 - R_t) \right] = a_1 (r_0 - R_t) a Cha(r_0 - R_t) + a_2 (r_0 - R_t) - Cha(r_0 - R_t) \quad (30в)$$

где $a = \sqrt{\frac{\lambda}{D}}$ - длина диффузии пробега трития.

Решив систему исходных дифференциальных уравнений в частных производных, найдем $a_0 = \frac{\Lambda C_{Li} r_0}{\lambda}$. Тогда распределение концентрации трития в приповерхностном слое зерна ($r_0 - R_t \leq r \leq r_0$):

$$C_T = \frac{\Lambda C_{Li}}{\lambda} \left(1 - \frac{r_0}{r} \frac{Shar}{Shar_0} \right) \quad (31)$$

Рассчитав градиент $\left(\frac{\partial C_T}{\partial r} \right)_{r=r_0}$ и подставив его в (25), получим выражение для нормированного диффузионного потока трития из сферы с учётом обеднения приповерхностного слоя из-за эффекта отдачи:

$$J_D^* = \frac{3}{2\tilde{y}^2} \left\{ \frac{1}{\tilde{x}} - \frac{Sh[\tilde{y}(1-\tilde{x})]}{\tilde{x}Sh\tilde{y}} - 1 \right\} + \frac{3}{2\tilde{y}} \left\{ \left(1 - \frac{\tilde{x}}{2} - \frac{1}{\tilde{x}\tilde{y}} \right) Cth\tilde{y} + \frac{Ch\tilde{y}(1-\tilde{x})}{\tilde{x}\tilde{y}^2 Sh\tilde{y}} \right\} \quad (32)$$

где $\tilde{x} = \frac{R_t}{r_0}$; $\tilde{y} = r_0 \sqrt{\frac{\lambda}{D}}$.

Частные случаи:

Если $\tilde{y}(1-\tilde{x}) \gg 0$ и $\tilde{y} \gg 1$, то

$$J_D^* = \frac{3}{2\tilde{y}^2} \left\{ (\tilde{y}-1) \left(1 + \frac{1}{\tilde{x}\tilde{y}} - \frac{e^{-\tilde{x}\tilde{y}}}{\tilde{x}\tilde{y}} \right) - \frac{\tilde{x}\tilde{y}}{2} \right\} \quad (33a)$$

Если $\tilde{x} \ll 1$, то

$$J_D^* = \frac{3}{\tilde{y}} \left(Cth\tilde{y} - \frac{1}{\tilde{y}} \right) \quad (33б)$$

Если $\tilde{y} > 3$, то

$$J_D^* = \frac{1 - \frac{1}{\tilde{y}}}{3\tilde{y}} \quad (33в)$$

Если $\tilde{y} \rightarrow \infty$, то

$$J_D^* = \frac{3}{\tilde{y}} \quad (33г)$$

Для больших зерен полный нормированный поток трития из сферы с учетом обеднения тритием приповерхностного слоя сферы за счет эффекта отдачи:

$$J^* = J_R^* + J_D^* = \frac{3\tilde{x}}{4} + \frac{3}{\tilde{y}} \quad (34)$$

(Здесь поток атомов отдачи трития J_R описывается формулой (33а)).

Замечание. При необходимости, можно учесть переход трития в НТО. Для этого достаточно во всех формулах заменить параметр λ_2 на $\Lambda_2 = k_x + \lambda$.

Заклучение

В рамках математического моделирования процессов выгорания, генерации и выделения трития получены:

1. Дифференциальное уравнение, описывающее изменение числа атомов лития-6 (N_1) во времени;
2. Уравнение, описывающее число атомов трития, образовавшегося из лития – 6;
3. Уравнение, описывающее выделение трития из сферической гранулы за счет отдачи;
4. Уравнение, описывающее поток атомов отдачи трития из сферической гранулы.
5. Уравнение, описывающее выделение трития за счет диффузии;
6. Уравнение, описывающее общее число атомов трития, выделяющихся из зерна в единицу времени за счет эффекта отдачи (поток) в стационарном состоянии выражение для стационарного потока атомов отдачи трития из сферы;

А так же удалось провести оценки минимальной ($\Phi=1,0 \cdot 10^{14}$ н/см²с, $\sigma=300$ барн) и максимальной ($\Phi=1,4 \cdot 10^{14}$ н/см²с, $\sigma=940$ барн) степеней выгорания лития-6 в ходе всего реакторного облучения. Минимальная ожидаемая степень выгорания лития-6 равна - 10%, а максимальная - 35%. Экспериментальное значение 23% (остаточная концентрация лития-6 - 77%) разумно укладывается в этот интервал. Показано, что высокообогащённая по литию-6 керамика на базе метатитаната лития может служить устойчивым (по крайней мере до степеней выгорания 22%) источником трития для установок управляемого термоядерного синтеза.

Литература

1. И.Л. Тажибаева, Е.А. Кенжин, П.В. Чакров, Ф.М. Аринкин, Ш.Х. Гизатулин, Е.С. Бекмухамбетов, В.П. Шестаков, Е.В. Чихрай, Т.В. Кульсартов, А.Куйкабаева, Н. Kawamura, К. Tshuchiya // Использование реактора ВВР-К для длительных радиационных испытаний литиевой керамики Li₂TiO₃ для blankets ТЯР // Вопросы Атомной Науки и Техники, серия: термоядерный синтез
2. Y. Chikhray, V. Shestakov, T. Kulsartov, I. Tazhibayeva, N. Kawamura, A. Kuykabayeva // Measurement System for In-pile Tritium Monitoring from Li₂TiO₃ Ceramics at WWRK Reactor // Journal .Nuclear Materials, 2004 .
3. А.А. Куйкабаева. Массо-перенос трития генерируемого в литиевой керамике при воздействии нейтронного облучения. // Международный конгресс студентов и молодых ученых. «Мир науки» 24-25 апрель, Алматы, 2007. с.77.
4. I.N. Beckman, A.A. Shviryaev, V. Balek // Use of computing programmes for evaluating results of diffusion experiments // Synthetic polymeric membranes (Eds. B. Sedlacek, J. Kohovec), 1987, Walter de Gruyter, Berlin-New-York, printed in Germany, с.363-375.

РЕАКТОРЛЫҚ СӘУЛЕЛЕНДІРУ ЖАҒДАЙЫНДАҒЫ ТРИТИДІҢ ЖАНУ, ПАЙДА БОЛУ, БӨЛІНУ ҮРДІСТЕРІН МАТЕМАТИКАЛЫҚ МОДЕЛЬДЕУ

И.Н. Бекман, И.Л. Тәжибаева, А.А. Құйкабаева, И.М. Бунцева

Бұл жұмыста сәулелендіру жағдайын есепке ала отырып литий керамикалы үлгілерінде тритийдің жану, пайда болу, бөліну үрдістерін математикалық модельдеу жүргізілді. Метатитанат литий термаядролық реакторлардың blanketтерінің тритий пайда болатын аумағында қолданылуына өте қолайлы болып табылатындығы көрсетілген.

MATHEMATICAL MODELLING OF PROCESSES OF BURNING OUT, GENERATION AND RELEASE TRITIUM IN CONDITIONS REACTOR IRRADIATION

I. Beckman, I. Tazhibayeva, A. Kuykabayeva, I. Buntseva

Goal of this work is mathematical modelling of processes of burning out, generation and release tritium from the irradiated lithium ceramics samples. is shown, that metatitanate lithium are most perspective a material for their application in zones of reproduction tritium in blanket thermonuclear reactors.