Конспект занятия 21.   
Цель.  
Рассмотреть частные случаи решения задачи и сопоставить их с экспериментальными результатами. Обосновать дополнительные гипотезы о связях между параметрами переноса и необходимость их введения при решении задачи по восстановлению параметров по экспериментальным данным. Представить методику определения энергий активации и предэкпоненциальных членов коэффициентов диффузии.

## План.

1. Частные случаи решения задачи и их сопоставление с экспериментальными результатами.

2. Дополнительные гипотезы о связях между параметрами переноса.

3. Методика определения энергий активации и предэкпоненциальных членов коэффициентов диффузии.

Относительный выход ГПД с внешней поверхности образца (отношение выхода газа с поверхности образца в единицу времени к количеству газа образующегося в образце в единицу времени) по механизму диффузии по границам зерен имеет следующий вид:

 х  **(7)**

Рассмотрим важные для нас два частных случая, вытекающих из уравнения **(7)**. Для обоих случаев *DL,Dgb* << 1 и квадратные скобки, содержащие эти величины становятся равными единицам.

 **(7-1)**

Предположим теперь:

1. *А >> λ* и

 **(8)**

2. *А << λ* и

 **(9)**

Коэффициенты диффузии в соотношениях **(8)** и **(9)** являются функциями температуры:

*DL = DL0 Exp(-QL /T)* **(10)**

*Dgb = Dgb0 Exp(-Qgb /T)* **(11)**

Соотношения между эмпирически определенными энергиями активациями в уравнениях **(3)** и **(4)** предыдущей главы и энергиями активации в соотношениях **(8)** и **(9)** определяются следующими соотношениями:

*QЭ =0,5 Qgb + 0,25 QL* **(12)**

для уравнения **(8)** и

*QЭ =0,5 Qgb + 0,5 QL* **(13)**

для уравнения **(9).**

Важным фактом, вытекающим из анализа соотношений **(8)** и **(9)**, является зависимость выхода от постоянной распада *λ* .

Эта зависимость для уравнения **(8)**

*Fgb ~ λ (-0.75)* **(14)**

и для уравнения **(9)**

*Fgb ~ λ (-1.00)* **(15)**

Обратим внимание на соотношения **(3)** и **(4)**. Зависимости от постоянной распада в этих эмпирических соотношениях отличаются от полученных в результате рассмотрения аналитических решений **(8)** и **(9)** на 5% для образцов **f** и на 2% для образцов с соответственно. Это различие лежит в пределах погрешности эксперимента, поэтому примем за основу возможность проведения дальнейшего анализа на основе соотношений **(3)** для образцов **f** и **(4)** для образцов **с.**

4. Методика восстановления параметров диффузионного переноса по экспериментальным данным выхода газов - продуктов деления.

4. 1. Методика обработки экспериментальных данных.

Аналитические соотношения для определения выхода газов продуктов деления, как функция от коэффициентов диффузии обладает значительной неопределенностью, что приводит к необходимости формулировки дополнительных гипотез о связях между параметрами переноса.

Установим общие правила обработки экспериментальных данных для решения основной задачи дипломного проекта: восстановления параметров переноса на основе двухстадийной диффузионной модели.

Эти правила [34] и [31] сводятся к следующему:

- анализ производится на основе программы **Statistica 6** с использованием её линейной и нелинейной подпрограмм.

- зависимость от постоянной распада определяется соотношениями **(8)** для образца **f** и **(9)** для образца **с**.

- коэффициенты диффузии являются функциями температуры в соответствии с соотношениями **(10)** и **(11)**.

- соотношения **(12)** и **(13)** между энергиями активации являются желательными.

- энергии активации зернограничной диффузии меньше энергий активации объёмной для данного типа образцов и их отношения могут составлять величину от 0,2 до 0,8.

- близкие значения энергий активации объёмной диффузии рассматриваются как предпочтительные для образцов **с** и **f**.

- отношение зернограничных и объёмных коэффициентов диффузии должно находится в пределах 103- 106.

**Энергии активации объёмной и зернограничной диффузии.**

Рассмотрим связи между энергиями активации.

Уравнения **(12)** для образца **f** и уравнение **(13)** для образца **с** представляют собой систему:

*QЭф =0,5 Qgbф + 0,25 QLф* **(16)**

*QЭс =0,5 Qgbс + 0,5 QLс* **(17)**

где

*QЭф, QЭс -* эффективные (эмпирические) энергии активации выходов ГПД для образцов **f** и **с** соответственно.

*Qgbф, Qgbс* - энергии активации зернограничной диффузии для образцов **f** и **с**.

*QLф, QLс -* энергии активации объёмной диффузии для образцов **f** и **с**.

Предположим, что энергии активации объёмной диффузии для образцов **f** и **с** одинаковы, а отношения зернограничных энергий активации к объёмным известны, тогда:

*QLф= QLс= QL* **(18)**

*Qgbф=nф QL* **(19)**

*Qgbс=nc QL* **(20)**

Выше представленные соотношения подставим в уравнения **(16)** и **(17)**:

*QЭф =0,5 nф QL + 0,25 QL* **(21)**

*QЭс =0,5 nc QL + 0,5 QL* **(22)**

Просуммируем уравнения **(21)** и **(22)**:

*QЭф+ QЭс=0,5 QL[(nф+ nc)+1.5]* **(23)**

Рекомендованное в [34] каждое из значений n ~ 0. 5, поэтому примем их сумму равной 1, и из уравнения **(20)** получим значение *QL=0,8(QЭф+ QЭс) =* 21493 К, эта величина энергии активации объёмной диффузии дает возможность определить значение отношений энергий активации зернограничной и объёмной диффузии - уравнения **(21)**, **(22)**, и значения самих энергий активации зернограничной диффузии: *Qgbф =* 17904 Ки

*Qgbс =* 3589К*.*

Полученное значение энергии активации объёмной диффузии

*QL =* 21493 К ГПД практически совпадает с энергией активации радиационно-стимулированного коэффициента объёмной диффузии ГПД по механизму вытеснения междоузельных ионов при диффузии ГПД в коаксиальной зоне трека (КАЗТ), которая составляет 22620 К по расчетам представленным в работах [35, 36].

**Предэкспоненциальные множители коэффициентов диффузии и параметры переноса.**

Уравнения **(8)** для образца **f** и **(9)** для **с** можно представить в следующем виде:

 **(24)**

 **(25)**

В левой части этих соотношений представлены приведенные по постоянной распада выходы ГПД для образца типа **f (24)** и образца **с (25)**, в правой части содержатся эффективные значения энергий активации, удовлетворяющие соотношениям **(16)** и **(17)** в соответствии с методикой выбора, представленной в предыдущем разделе.

Используя программу статистики для всего массива экспериментальных данных, можно определить значения множителей перед экспонентой для образцов **f** и **с** соответственно, эти значения равны множителям в уравнениях **(3)** и **(4).** Подставляя в уравнения **(24)** и **(25)** значения геометрических параметров образцов и пористости, а также используя предположения о связи между коэффициентами зернограничной и объёмной диффузии вида:

*Dgbf0=mf\* DLf0* **(26)**

*Dgbc0=mc\* DLс0* **(27)**

После подстановки соотношений **(26)** и **(27)** в выражения **(24)** и **(25)**, множители перед экспонентами будут составлять систему вида:

 **(28)**

 **(29)**

Предположим теперь, что *DLf0* = *DLс0* и после подстановки конкретных значений в систему уравнений **(28)**, **(29)** получим следующее уравнение:

 **(30)**

Соотношение **(30)** необходимо рассмотреть при дополнительных условиях:

*ξf , ξc ≤ 1,* **(31)**

*103 ≤ mf , mc ≤ 106* **(32)**

Случай *ξf = ξc , mf = mc* противоречит физическому смыслу, т.к. не выполняется соотношение **(31)** при соблюдении условия **(32)**.

Рассмотрим случай *mf = mc* , тогда уравнение **(30)** имеет вид:

 **(33)**