

Лекция 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 предэкспоненциальных 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 предэкспоненциальных 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:

$$F_{gb} = \frac{9}{\xi \varepsilon a R (1 - \varepsilon)} \sqrt{\frac{D_{gb} D_L}{\lambda (A + \lambda)}} \times \left[\coth \left(a \sqrt{\frac{(A + \lambda)}{D_L}} \right) - \left(\frac{1}{a} \sqrt{\frac{D_L}{(A + \lambda)}} \right) \right] * \left[\coth \left(R \sqrt{\frac{(A + \lambda)}{D_{gb}}} \right) - \left(\frac{1}{R} \sqrt{\frac{D_{gb}}{(A + \lambda)}} \right) \right] \quad (7)$$

Рассмотрим (7), когда аргументы при \coth больше единицы, что соответствует $D_L D_{gb} \ll 1$ и квадратные скобки, содержащие эти величины становятся равными единицам. В этом случае:

$$F_{gb} = \frac{9}{\xi \varepsilon a R (1 - \varepsilon)} \sqrt{\frac{D_{gb} D_L}{\lambda (A + \lambda)}} \quad (7-1) \quad \text{и} \quad A = \frac{3}{\xi a \varepsilon} \sqrt{D_L \lambda}$$

При $A \gg \lambda$ (7-1) имеет вид:

$$F_{gb} = \frac{3}{(1 - \varepsilon)} \cdot \sqrt{\frac{3}{\xi \varepsilon}} \sqrt{\frac{D_{gb}}{R^2 \lambda}} \sqrt{\frac{D_L}{a^2 \lambda}} \quad (8)$$

При $A \ll \lambda$ (7-1) имеет вид:

$$F_{gb} = \frac{9}{\xi (1 - \varepsilon) \varepsilon} \cdot \sqrt{\frac{D_{gb} D_L}{[aR]^2 \lambda^2}} \quad (9)$$

Соотношения между параметрами переноса.

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

$$D_L = D_{L0} \text{Exp}(-Q_L / T) \quad (10)$$

$$D_{gb} = D_{gb0} \text{Exp}(-Q_{gb} / T) \quad (11)$$

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

$$Q_3 = 0,5 Q_{gb} + 0,25 Q_L \quad (12)$$

для уравнения (8) и

$$Q_3 = 0,5 Q_{gb} + 0,5 Q_L \quad (13)$$

для уравнения (9).

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

Эта зависимость для уравнения (8)

$$F_{gb} \sim \lambda^{(-0.75)} \quad (14)$$

и для уравнения (9)

$$F_{gb} \sim \lambda^{(-1.00)} \quad (15)$$

Соотношения между параметрами переноса.

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 s 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 s .

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.

Методика обработки экспериментальных данных.

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 **c**.
- 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 **c** и **f**.
- отношение зернограничных и объёмных коэффициентов диффузии должно находиться в пределах 10^3 - 10^6 .

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:

$$Q_{Эф} = 0,5 Q_{gbf} + 0,25 Q_{Lф} \quad (16)$$

$$Q_{Эс} = 0,5 Q_{gbc} + 0,5 Q_{Lс} \quad (17)$$

где

$Q_{Эф}, Q_{Эс}$ - эффективные (эмпирические) энергии активации выходов ГПД для образцов f и с соответственно.

Q_{gbf}, Q_{gbc} - энергии активации зернограничной диффузии для образцов f и с.

$Q_{Lф}, Q_{Lс}$ - 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:

$$Q_{Lф} = Q_{Lс} = Q_L \quad (18)$$

$$Q_{gbf} = n_f Q_L \quad (19)$$

$$Q_{gbc} = n_c Q_L \quad (20)$$

Энергии активации объёмной и зернограничной диффузии.

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

$$Q_{\text{Эф}} = 0,5 n_{\phi} Q_L + 0,25 Q_L \quad (21)$$

$$Q_{\text{Эс}} = 0,5 n_c Q_L + 0,5 Q_L \quad (22)$$

Просуммируем уравнения (21) и (22):

$$Q_{\text{Эф}} + Q_{\text{Эс}} = 0,5 Q_L [(n_{\phi} + n_c) + 1,5] \quad (23)$$

Рекомендованное в [10] каждое из значений $n \sim 0,5$, поэтому примем их сумму равной 1, и из уравнения (20) получим значение $Q_L = 0,8(Q_{\text{Эф}} + Q_{\text{Эс}}) = 21493 \text{ К}$, 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:

$$Q_{\text{gb}\phi} = 17904 \text{ К} \text{ и } Q_{\text{gbc}} = 3589 \text{ К}.$$

Полученное значение энергии активации объёмной диффузии

$$Q_L = 21493 \text{ К}$$

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 [11, 12].

Предэкспоненциальные множители коэффициентов диффузии и параметры переноса.

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

$$F_{gb} * (\lambda)^{**0,75} = \frac{3}{(1-\varepsilon)} \cdot \sqrt{\frac{3}{\xi\varepsilon}} \sqrt{\frac{D_{gb0}}{R^2}} \sqrt{\frac{D_{L0}}{a^2}} * \text{Exp}(-Q_y / \dot{O}) \quad (24)$$

$$F_{gb} * \lambda = \frac{9}{\xi(1-\varepsilon)\varepsilon} \cdot \sqrt{\frac{D_{gb0} D_{L0}}{[aR]^2}} * \text{Exp}(-Q_y / T) \quad (25)$$

В левой части этих соотношений представлены приведенные по постоянной распада выходы ГПД для образца типа **f** (24) и образца **c** (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 **c** соответственно, эти значения равны множителям в уравнениях (3) и (4).

Предэкспоненциальные множители коэффициентов диффузии и параметры переноса.

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:

$$D_{gbf0} = m_f * D_{Lf0} \quad (26)$$

$$D_{gbc0} = m_c * D_{Lc0} \quad (27),$$

получим :

$$A_f = \frac{3}{(1-\varepsilon)} \cdot \sqrt{\frac{3}{\xi_f \varepsilon}} \sqrt{\frac{m_f D_{Lf0}}{R^2}} \sqrt{\frac{D_{Lf0}}{a^2}} \quad (28)$$

$$A_c = \frac{9}{\xi_c (1-\varepsilon) \varepsilon} \cdot \sqrt{\frac{m_c D_{Lc0} D_{Lc0}}{[aR]^2}} \quad (29)$$

Предположим теперь, что $D_{Lf0} = D_{Lc0}$ и после подстановки численных значений A_f и A_c в систему уравнений (28), (29), исключая D_L , получим следующее уравнение:

$$\frac{\xi_{\tilde{n}}}{\sqrt{m_c}} = 13.3 * \left(\frac{\xi_f}{m_f} \right)^{2/3} \quad (30)$$

Предэкспоненциальные множители коэффициентов диффузии и параметры переноса.

Соотношение (30) необходимо рассмотреть при дополнительных условиях:

$$\xi_f, \xi_c \leq 1, \quad (31)$$

$$10^3 \leq m_f, m_c \leq 10^6 \quad (32)$$

Случай $\xi_f = \xi_c, m_f = m_c$ противоречит физическому смыслу, т.к. не выполняется соотношение (31) при соблюдении условия (32).

Рассмотрим случай $m_f = m_c$, тогда уравнение (30) имеет вид:

$$\frac{\xi_{\tilde{n}}}{\sqrt{m}} = 13 * \left(\frac{\xi_f}{m} \right)^{2/3} \quad (33)$$