

Úloha VI.5 ... gadoliniová koule

9 bodů; průměr 2,97; řešilo 34 studentů

Jaké nejmenší množství gadolinia 148 je nutné dát k sobě dohromady, aby se svým jaderným rozpadem zahřívalo tak, že by došlo k lokálnímu tavení? Uvažujte, že probíhají pouze rozpady α a že materiál je ve vzduchu pokojové teploty.

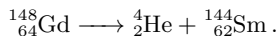
Karel přemýšlel nad pruky a Matěj Rz. ho změnil.

Úloha kombinuje více jevů

1. jaderný rozpad,
2. interakce záření s hmotou,
3. sdílení tepla.

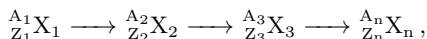
Teorie

Teorie týkající se jaderného rozpadu a interakce záření s hmotou potřebná k této úloze, je v úloze T.5 z Fyziklání 2021.¹ Jádru ^{148}Gd je nestabilní a rozpadá se. Jelikož jde o těžké jádro, rozpadá se α rozpadem²



Při rozpadu se uvolňuje značné množství energie (v literatuře známé jako „Q-value“) – v našem případě 3 271 keV na 1 rozpad.³

Při jaderném rozpadu je nutno zmínit, že dceřiné jádro⁴ se také může rozpadat. Zde toto vlastně vůbec nemusíme řešit, protože zadání říká, že koule je z ^{148}Gd . Kdybychom zadali, že je potřeba uvažovat časovou závislost, problém by se trochu zkomplikoval. Zde máme ten jednodušší případ – ^{148}Gd se rozpadá pouze rozpadem alfa⁵ a dceřiné ^{144}Sm je stabilní.⁶ V případě, že bychom měli kaskádu po sobě jdoucích rozpadů



dostali bychom soustavu diferenciálních rovnic, tzv. Batemanovy rovnice.⁷ Jejich řešením bychom dostali časové závislosti množství jader $N_i(t)$, resp. jejich aktivit $A_i(t)$ a z nich pak tepelný výkon v čase.

Částice α jsou těžké a nabitě, proto interagují s hmotou intenzivně, a tedy se rychle zastavují. Konkrétně zde máme na mysli elektromagnetickou interakci částice α (s nábojem $+4e$) s nabitými částmi okolní hmoty (jádra, elektrony), která vede k ionizaci okolního prostředí. Pro představu toho, jak rychle částice α interaguje, uvedme, že její střední volná dráha ve vzduchu je sotva 20 cm nebo se (dle známé poučky⁸) dá zastavit listem papíru. Z tohoto důvodu můžeme předpokládat, že vzniklé α částice se zastaví ještě v materiálu (Gd) a předají mu energii. Sou-

¹<https://fyziklani.cz/download/2021/reseni.pdf>

²<http://nucldata.nuclear.lu.se/toi/nuclide.asp?iZA=640148>

³<http://nucldata.nuclear.lu.se/toi/nuclide.asp?iZA=640148>

⁴„mateřské jádro“ je původní (na levé straně rovnice), „dceřiné“ je nově vzniklé (na pravé straně rovnice)

⁵<http://nucldata.nuclear.lu.se/toi/nuclide.asp?iZA=640148>

⁶<http://nucldata.nuclear.lu.se/toi/nuclide.asp?iZA=620144>

⁷https://en.wikipedia.org/wiki/Bateman_equation

⁸https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Alfa_beta_gamma_neutron_radiation.svg

čet energií všech rozpadů pak vede k nezanedbatelnému tepelnému výkonu a tedy k zahřívání materiálu.⁹ Tepelný výkon na jednotku objemu P_V pak můžeme odvodit přímo z definice

$$P_V = \frac{Q\Lambda N_A \rho}{M}, \quad (1)$$

kde Q je Q-value, ρ je hustota, M je molární hmotnost, $\Lambda = (\ln 2)/T$ je rozpadová konstanta a N_A je Avogadrova konstanta. Součin ΛN_A má význam aktivity 1 molu materiálu, tj. kolik jader se rozpadne za 1 s v 1 molu látky.

Přenos tepla se realizuje

- kondukcí (neboli *vedením*),
- konvekcí (neboli *prouděním*),
- radiací (neboli *zářením*).

Kondukcce je realizována srážkami atomů nebo kmity krystalické mřížky¹⁰ – proto je typicky výraznější v pevných látkách, hlavně v kovech. V tekutinách existuje také, ale většinou je zanedbatelná kvůli větším meziatomárním vzdálenostem. Pro obecný popis kondukcce slouží rovnice vedení tepla

$$a \nabla^2 T + \frac{P_V}{\rho c_p} = \frac{dT}{dt}, \quad (2)$$

kde $a = \lambda/\rho c_p$ je součinitel teplotní vodivosti (λ je součinitel tepelné vodivosti, c_p je měrná tepelná kapacita), T je teplota, ρ je hustota materiálu a t je čas. Rovnice popisuje bilanci tepla v systému. Vstupními veličinami jsou vlastnosti materiálu a geometrie, řešením pak získáme teplotní profil, tj. závislost $T(x, y, z, t)$.

Konvekce je realizována přesunem hmoty – tj. atomy skutečně mění svou rovnovážnou polohu, pohybují se často po komplikovaných trajektoriích. Z tohoto důvodu o ní hovoříme u tekutin. Podle působení vnějších sil odlišujeme nucenou konvekci, kde je proudění tekutiny hnáno nějakou vnější silou (např. prací čerpadla), a přirozenou, která funguje díky vztlakovým silám vznikajícím v důsledku teplotní roztažnosti tekutiny – horká tekutina má menší hustotu, proto vlivem vztlakových sil stoupá vzhůru.

Z hlediska množství tepla odvedeného z jednotkové plochy je výraznější nucená konvekce, v absolutním měřítku je pak významnější přirozená, neboť se realizuje i ve velkých systémech (jako je zemská kůra nebo hvězdy).

Sdílení tepla radiací je realizováno přímo uvolňováním fotonů. Každý předmět s nenulovou (absolutní) teplotou vyzařuje. Zářivost (množství energie předané radiací za 1 s jednotkovou plochou) je daná vztahem

$$M_e = \sigma T^4, \quad (3)$$

kde $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-4}$ je Stefan-Boltzmannova konstanta.¹¹ Konstanta σ je malá, ale člen T^4 roste rychle, proto je pro vysoké teploty radiace dominantní. Jelikož vyzařují všechny objekty, musíme k získání energetické bilance od vyzářené energie odečíst energii přijatou absorpcí záření z okolního prostředí

$$M_{e,\text{ef}} = M_{e,\text{plocha}} - M_{e,\text{okolí}} = \sigma (T_{\text{plocha}}^4 - T_{\text{okolí}}^4).$$

⁹Ne zcela – částice vzniklé blízko okraje materiálu, které jsou emitovány směrem ven, mohou uniknout a tedy svoji energii předají okolí (zde vzduchu). Jelikož se tato vrstva dá omezit určitou hloubkou, její význam klesá s tloušťkou materiálu.

¹⁰Z tohoto důvodu můžeme říct, že se tepelné vzruchy šíří rychlostí zvuku, neboť mechanismus je stejný.

¹¹Odvození je nad rámec této úlohy. Pro zvědavé řešitele prozradíme, že vztah vznikl integrací Planckova vyzařovacího zákona přes všechny vlnové délky a přes prostorový úhel.

Výše uvedený vztah potřebuje ještě korekci na odrazivost – ne všechno dopadající záření se absorbuje – něco se odrazí. Poměrnou část absorbované energie vyjadřuje absorpance α

$$M_{e,ef} = M_{e,plocha} - \alpha M_{e,okolí} = \sigma (T_{plocha}^4 - \alpha T_{okolí}^4) .$$

Výpočet

K tavení potřebujeme, aby teplota v nejteplejším místě byla vyšší než teplota tavení. Z tabulek¹² zjistíme teplotu tavení $T_{melt} = 1585$ K. Zamysleme se nad tím, v jaké geometrii dosáhneme v daném množství materiálu největší teplotu ve středu. Tu získáme, pokud

- minimalizujeme plochu, protože zmenšením plochy snížíme přestup tepla, tedy k ustálení rovnováhy se objekt bude muset více zahřát,
- maximalizaci vzdálenosti „nejvíc vnitřního“ bodu od okraje – protože teplota roste směrem od povrchu.

Bez důkazu použijeme fakt, že výše uvedené vlastnosti splňuje koule. Jelikož je koule pevná, bude přestup tepla realizován hlavně vedením – proto řešíme rovnici vedení tepla (2) v kulové geometrii. Chceme řešit stacionární stav (tj. stav, který nastane po dostatečně dlouhé době, kdy bude systém v rovnováze a už se nebude měnit v čase). Proto bude pravá strana rovnice rovna nule

$$a \nabla^2 T + \frac{P_V}{\rho c_p} = 0 . \quad (4)$$

Pro další ulehčení můžeme celou rovnici vydělit a a dostaneme

$$\nabla^2 T + \frac{P_V}{\lambda} = 0 . \quad (5)$$

Laplaceův operátor v kulové geometrii (za předpokladu, že problém je závislý pouze na radiální souřadnici¹³) je

$$\nabla_{\text{sph}}^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) .$$

Dosazením do (5) dostáváme

$$\begin{aligned} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{P_V}{\lambda} &= 0 , \\ \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right) &= -\frac{P_V}{\lambda} r^2 , \\ r^2 \frac{\partial T}{\partial r} &= -\frac{P_V}{3\lambda} r^3 + C_1 . \end{aligned}$$

Jako okrajovou podmínku volíme, že uprostřed koule je maximum, tj.

$$\frac{\partial T}{\partial r} (r = 0) = 0 = C_1 .$$

¹²<https://www.webelements.com/gadolinium/thermochemistry.html>

¹³Což zde není zcela pravda, viz diskusi.

Pokračujeme další integrací

$$\begin{aligned} r^2 \frac{\partial T}{\partial r} &= -\frac{P_V}{3\lambda} r^3, \\ \frac{\partial T}{\partial r} &= -\frac{P_V}{3\lambda} r, \\ T(r) &= -\frac{P_V}{6\lambda} r^2 + C_2. \end{aligned}$$

Nakonec použijeme okrajovou podmínku na známou teplotu ve středu $T(r=0) = T_{\text{in}}$

$$T(r) = T_{\text{in}} - \frac{P_V}{6\lambda} r^2,$$

pro teplotu na okraji pak platí

$$T(R) = T_{\text{in}} - \frac{P_V}{6\lambda} R^2. \quad (6)$$

Teplotu na okraji určíme z podmínky, že celý tepelný výkon koule musí být odveden. Počítat přirozenou konvekci by bylo složité, proto udělejme pro začátek odhad, že všechno teplo je do okolí předáváno radiací a že absorpance je 1, tj. vše, co na kouli dopadne, je pohlceno. Pak

$$P_V V = SM = S\sigma (T_{\text{surf}}^4 - T_{\text{out}}^4). \quad (7)$$

Dosazením za objem a povrch koule a za teplotní průběh v kouli dostaneme

$$T_{\text{in}} = \frac{P_V}{6\lambda} R^2 + \sqrt[4]{\frac{P_V}{3\sigma} R + T_{\text{out}}^4}. \quad (8)$$

Explicitně vyjádřit R tak, aby $T_{\text{in}} = T_{\text{melt}}$ by bylo náročné, můžeme si pomoci vykreslením grafu $T_{\text{in}}(R)$ a najdeme, kde nastane $T_{\text{in}} = T_{\text{melt}}$. Postupně použijeme $T_{1/2} = 74,6$ y (z Nuclear Data Search¹⁴) na získání rozpadové konstanty Λ , dále pak $Q = 3271,21$ keV (tentýž zdroj), $N_A = 6,022 \cdot 10^{+23}$ mol⁻¹ (Avogadrova konstanta), $\rho = 7900$ kg·m⁻³ (z Wikipedie¹⁵) a $M = 0,148$ kg·mol⁻¹ (nic lepšího jsme nenašli) do vztahu (1) a získáme P_V . Dále $T_{\text{out}} = 293,15$ K (ze zadání) a $\lambda = 10,6$ W·m⁻¹K⁻¹ (taktéž z Wikipedie) do (8) a dostaneme závislost na obr. 1. Oblíbenou numerickou metodou nebo hrubou silou zjistíme

$$R = 7,01 \text{ cm}.$$

Z toho vyplývá $m = 11,4$ kg.

Vliv přirozené konvekce

Pojďme vyhodnotit vliv přirozené konvekce – ve výpočtech výše jsme ji zanedbali, ale nijak jsme to neobhájili. Do bilanční rovnice (7) přidáme člen za přirozenou konvekci q_{conv}

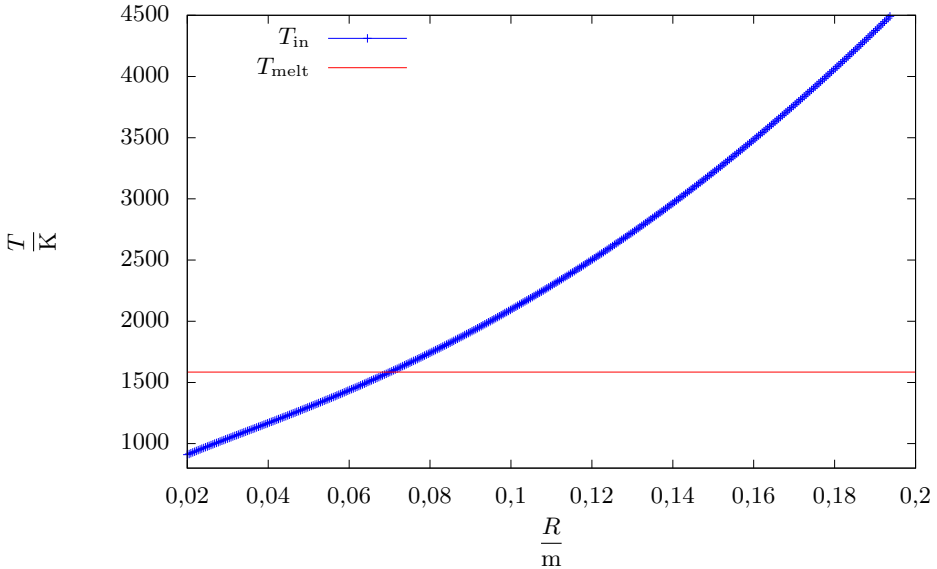
$$P_V V = S (\sigma (T_{\text{surf}}^4 - T_{\text{out}}^4) + q_{\text{conv}}). \quad (9)$$

Tento člen q_{conv} musíme určit. Pro přenos tepla mezi 2 médii se obecně používá Newtonův vztah

$$q_{\text{conv}} = \alpha (T_{\text{surf}} - T_{\infty}),$$

¹⁴<http://nucleardata.nuclear.lu.se/toi/nuclide.asp?iZA=640148>

¹⁵<https://en.wikipedia.org/wiki/Gadolinium>



Obr. 1: Závislost teploty T_{in} ve středu koule v závislosti na poloměru za předpokladu, že teplo je předáváno do okolí pouze radiací.

kde T_{∞} je „teplota dostatečně daleko v okolním médiu“, neboť tekutina v bezprostřední blízkosti horké koule bude mít teplotu vyšší. Potřebujeme najít součinitel α – ten je dán typem povrchu, tvarem a typem proudění – které je zase ovlivněno teplotou stěny, takže máme problém s příliš mnoha neznámými. Obecně α roste s rozdílem $T_{surf} - T_{\infty}$, protože vyšší nahlřátí stěny způsobí větší rozdíl hustot okolního vzduchu, což ve výsledku způsobí intenzivnější přirozené proudění. Přesný analytický výpočet neexistuje. Můžeme buď použít numerické řešení Navier-Stokesových rovnic s přenosem tepla, což umí většina moderních CFD softwarů,¹⁶ nebo použít podobnostní teorie a empirické korelace. Ukažme si tedy odhad pomocí podobnostní teorie (nechť nám teoretici odpustí). Pro výpočet α můžeme použít Nusseltovo podobnostní číslo definované jako

$$Nu = \frac{\alpha L}{\lambda},$$

kde L je charakteristický rozměr – v případě koule průměr. A Nusseltovo číslo Nu máme z korelace¹⁷

$$Nu = \left(2^{0,816} + 0,15 Ra_D^{0,277}\right)^{1/0,816},$$

kde Ra_D je Rayleighovo podobnostní číslo, definováno jako

$$Ra_D = \frac{g\beta}{\nu\alpha} (T_{surf} - T_{out}) D^3,$$

¹⁶CFD je z *Computational Fluid Dynamics* – typicky založeno na metodě konečných objemů. Příklady používaných kódů jsou ANSYS Fluent, Siemens StarCCM+ nebo OpenFOAM.

¹⁷<https://thermopedia.com/content/786/>

kde g je tíhové zrychlení, β je koeficient teplotní objemové roztažnosti, ν je kinematická viskozita a D je charakteristický rozměr – zde průměr. Po všech dosazeních dostaneme

$$\sigma (T_{\text{surf}}^4 - T_{\text{out}}^4) + \frac{\lambda}{2R} (T_{\text{surf}} - T_{\text{out}}) \cdot \left(2^{0,816} + 0,15 \left(\frac{g\beta}{\nu\alpha} (T_{\text{surf}} - T_{\text{out}}) \cdot 8R^3 \right)^{0,277} \right)^{1/0,816} - \frac{1}{3} P_V R = 0, \quad (10)$$

zde bychom ještě měli dosadit ze vztahu (6) pro převod T_{surf} na T_{in} , nakonec vyjádřit T_{in} v závislosti na R a zjistit, odkud bude $T_{\text{in}} > T_{\text{melt}}$ – anebo obráceně, dosadit $T_{\text{in}} = T_{\text{melt}}$ a vyřešit pro R . Rovnice je už tak velmi ošklivá, dosadíme $T_{\text{in}} = T_{\text{melt}}$, na počítači vypočítáme levou stranu rovnice (10) pro různá R a najdeme, kdy bude rovna nule. Dostaneme

$$R = 12,42 \text{ cm},$$

čemuž odpovídá hmotnost 63,34 kg. Mějme však na paměti, že vztahy jsou přibližné a vždy bychom se měli zajímat o jejich podmínky platnosti.

Ukázali jsme tedy, že původní předpoklad o dominantní radiaci byl špatný. Můžeme si jen pro zajímavost dopočítat, že povrchová teplota koule je 374 K, což vskutku není mnoho – mezi slupkou koule a vnitřkem je rozdíl přes 1 200 K, což je důsledek kombinace objemového zdroje tepla a spíše špatné tepelné vodivosti (pro příklad uveďme, že oceli mají zhruba $8 - 60 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$, hliník dokonce přes $200 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$; naopak izolační materiály jako polystyren $0,3 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$).

Nakonec ještě okomentujme předpoklad ze zadání, že nedochází ke štěpení. To nemůžeme říct zcela jistě – jen je problém, že pro štěpení nemáme dost dat, protože izotop ^{148}Gd se v přírodě běžně nevyskytuje ani se běžně nepoužívá (Gd se běžně používá jako vyhořívající absorbátor do jaderných reaktorů, ale tam se uplatňují hlavně ^{155}Gd a ^{157}Gd).

Kvůli vzácnosti tohoto izotopu je také úloha nereálná – je těžko představitelné, že by se někde nacházel α zářič v tak velkém množství. Když už, šlo by o velmi malá množství. Úloha byla inspirována radioizotopovými termoelektrickými generátory, kde se α zářiče skutečně používají k výrobě tepla – např. izotop ^{238}Pu v MMRTG¹⁸ na roveru Curiosity.

Dodatek – jaderná data

V úloze jsme data brali z „různých“, někdy až „příliš otevřených zdrojů“. Pro úlohu do FYKO-Su to není problém, ale v akademických pracích by uvedené zdroje nemusely být brány jako „dostatečně věrohodné“. Dále v komplikovanějších výpočtech by bylo potřeba ještě více dat – různé poločasy rozpadu, druh a energie produktů rozpadu; v případě neutronických výpočtů pak i účinné průřezy. Z výše uvedených důvodů je vhodné mít všechna data na jednom místě a někým ověřená.

Proto existují ENDF (*Evaluated Nuclear Data File*). Pro jednotlivé izotopy existují ENDF soubory obsahující různá data – účinné průřezy, produkty rozpadu, parametry jádra, . . . Existují celé knihovny ENDF souborů jako např. evropská knihovna JEFF nebo americká ENDF/B. Knihovny se typicky považují za důvěryhodný zdroj.¹⁹

¹⁸https://en.wikipedia.org/wiki/Multi-mission_radioisotope_thermoelectric_generator

¹⁹Pořad se liší množstvím dat a obecně poskytují trochu jiné výsledky. Akademici pak mají své favority, takže „vhodnost“ dat použitých na výpočet může být předmětem dlouhých debat.

Ukažme si na této úloze, jak v jaderných datech vyhledávat. Jedním z dostupných nástrojů je JANIS²⁰. Na hlavní stránce volíme tlačítko „Browse“, dále „Radioactive data“. Zvolíme knihovnu – např. JEFF-3.3. Dále „Radioactive decay data“, „Gd“, „¹⁴⁸Gd“. Otevře se nám prázdné okno vizualizéru a dole v tabulce rozklikneme seznam „Decay data“ a v řádku „Discrete Alpha“ volíme T . V okně vizualizéru by se měla otevřít nová záložka s tabulkou s jedním řádkem 3 182 800 eV, tedy námi použitá hodnota se trochu lišila. Podobný postup bychom mohli použít pro jiná data týkající se nějakého izotopu a jeho rozpadů a reakcí.

Matěj Rzehulka

`matej.rzehulka@fykos.cz`

Fyzikální korespondenční seminář je organizován studenty MFF UK. Je zastřešen Oddělením propagace a mediální komunikace MFF UK a podporován Ústavem teoretické fyziky MFF UK, jeho zaměstnanci a Jednotou českých matematiků a fyziků. Realizace projektu byla podpořena Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy.

Toto dílo je šířeno pod licencí Creative Commons Attribution-Share Alike 3.0 Unported.

Pro zobrazení kopie této licence navštivte <https://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/>.

²⁰JANIS je pouze k prohlížení a vizualizaci jaderných dat, nejde o knihovnu. Je dostupná na <https://oecd-nea.org/janisweb/>