**МЕТОДИКА расчета содержания основных химических форм йода в воде аварийного приямка ВВЭР**

###### К.Д. Хорошилова, А.Б. Сазонов, В.А. Грачев, О.С. Быстрова, М.О. Сорокопуд

*НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва*

*эл. почта: Horoshilova\_KD@nrcki.ru*

Для расчета утечки радиоактивных продуктов деления (ПД) в окружающую среду при авариях на АЭС с ВВЭР применяется аттестованное программное средство (ПС) «LEAK3» [1]. В рамках этого ПС при оценке выбросов радиоактивного йода используется величина коэффициента распределения (КР) йода между паром и раствором приямка защитной оболочки. Однако на сегодняшний день в «LEAK3» отсутствует методика расчета этой величины: используются лишь отдельные значения КР для разных диапазонов кислотности/щелочности раствора. Целью данной работы стало создание такой методики.

На КР йода между водной и парогазовой фазой влияют, в первую очередь, его химические превращения. Йод – элемент с переменной валентностью и высокой реакционной способностью. В растворе аварийного приямка он присутствует сразу в нескольких химических формах: I2, I–, I3–, HIO, IO3– и др. Одни из этих форм обладают повышенной, а другие – напротив, очень низкой летучестью. При этом равновесие между формами и кинетика перехода из одной формы в другую определяется, помимо температуры, такими факторами, как водородный показатель, концентрации растворенных реагентов систем безопасности, ионов металлов, кислорода, а также мощность дозы ионизирующего излучения присутствующих в растворе радионуклидов. Для корректного определения КР все эти факторы в рамках методики должны учитываться одновременно.

Разработанная методика базируется на решении модельной системы уравнений химической кинетики, записанной в следующем виде:

,

где *Сi* – концентрация *i*-й частицы, *t* – время, *P* – мощность поглощенной дозы, *ρ* – плотность раствора, *G*0*i* – первичный радиационно-химический выход образования (разложения) *i*-й частицы, *kij* – константа скорости бимолекулярной реакции между *i*-й и *j*-й частицами [2], *δi*(*m*, *n*) = 1, если в ходе реакции между *m*-й и *n*-й частицами в качестве продукта образуется *i*-я частица (и 0 в остальных случаях). Суммирование ведется по всем видам частиц, включая основные химические формы йода, воду и продукты ее радиолиза, а также промежуточные активные частицы (радикалы и ион-радикалы); в результате система включает около 30 уравнений. Все реакции в описанной модели представляются как бимолекулярные. Пересчет значений *kij* на произвольную температуру проводится с использованием уравнения Аррениуса. Если значение энергии активации для реакции отсутствует в базах данных, оно принимается равным энергии активации самодиффузии воды: 12,6 кДж/моль. Мощность дозы излучения рассчитывается по текущей активности ПД в растворе в приближении полного поглощения β-частиц и частичного поглощения энергии γ-квантов.

Решение жесткой нелинейной системы дифференциальных уравнений ищется методом формул дифференцирования назад. Проведенные тестовые расчеты по определению концентраций химических форм йода в большинстве случаев показывают хорошее согласие с экспериментальными данными литературы. Таким образом, разработанная методика может служить для уточнения значений КР йода, использующихся в ПС «LEAK3».

**ЛИТЕРАТУРА**

1. Программа LEAK3. Федеральный надзор России по ядерной и радиационной безопасности. НТЦ ЯРБ Аттестационный паспорт программного средства. Регистрационный номер 118 от 02.03.2000 г.
2. <http://kinetics.nist.gov/solution>