

**Н. И. Родченкова, Ю. В. Заика** (Петрозаводск, ИПМИ КарНЦ РАН). **Численное моделирование десорбции водорода с цилиндрической поверхности с учетом захвата в объеме.**

Естественные концентрации водорода в металлах и сплавах при их производстве на металлургических предприятиях составляют от 0,1 до 100 ppm. Значительное содержание водорода в конструкционных материалах приводит к их охрупчиванию. Наряду с диффузией, лимитирующими факторами являются поверхностные процессы и захват атомов  $H$  различного рода дефектами (трещины, микрополости, включения гидридных фаз). Для контроля концентрации водорода разработан прибор [1]. Цилиндрический образец помещается внутрь вакуумного экстрактора из кварцевого стекла. Экстрактор помещается в печь с заданной температурой. При помощи масс-спектрометра фиксируется экстракционная кривая, подлежащая дальнейшей обработке. Работа, представленная данным сообщением, посвящена соответствующему математическому обеспечению.

Обозначения:  $L$  — радиус основания цилиндра,  $H$  — высота;  $c(t, r, z)$  — концентрация диффундирующего водорода,  $w(t, r, z)$  — в ловушке;  $q_1(t, z)$ ,  $q_{2,3}(t, r)$  — поверхностные концентрации (на боковой поверхности и на торцах);  $\bar{c}$  — равновесная концентрация  $H$ ;  $g(T)$  — коэффициент быстрого растворения;  $D(T)$ ,  $b(T)$  — коэффициенты диффузии и десорбции, зависящие от температуры по закону Аррениуса (например,  $b(T(t)) = b_0 \exp\{-E_b/[RT]\}$ ). При обратимом захвате  $a_i > 0$ , для распада гидрида  $a_1 = 0$ ,  $a_2 = 0$  ( $T < T_{\text{crit}}$ ),  $a_2 > 0$  ( $T \geq T_{\text{crit}}$ ). В силу симметрии начальных данных  $q_3 \equiv q_2$ . Десорбционный поток:  $J(t) = 4\pi b(t)(L \int_{H/2}^H q_1^2(t, z) dz + \int_0^L r q_2^2(t, r) dr)$ . Нагрев образца (из алюминиевого сплава) практически равномерный ( $T = T(t)$ ) [1]:  $\dot{T} = \sigma S(\tilde{c}\rho V)^{-1} 7 \cdot 10^{-5}(T + 64, 3)(T_e^4 - T^4)$ . Здесь  $T_e$  — температура экстрактора,  $S = 2\pi LH$ ,  $V = \pi L^2 H$ ,  $\rho$  — объемная плотность,  $\sigma$  — постоянная Стефана-Больцмана,  $\tilde{c}$  — удельная теплоемкость. Краевая задача термодесорбции водорода:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} &= D(t) \left( \frac{\partial^2 c}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial c}{\partial r} + \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right) - a_1 \frac{w_{\text{max}} - w}{w_{\text{max}}} c + a_2 w, \quad r \in (0, L), \quad z \in (0, H), \\ \frac{\partial w}{\partial t} &= a_1 [1 - w/w_{\text{max}}] c - a_2 w, \quad c(0, r, z) = \bar{c}, \quad w(0, r, z) = \bar{w} = \frac{a_1 \bar{c} w_{\text{max}}}{a_1 \bar{c} + a_2 w_{\text{max}}}, \\ \frac{\partial c}{\partial r} \Big|_{r=+0} &= 0, \quad \frac{\partial c}{\partial z} \Big|_{z=H/2} = 0, \quad D(t) \equiv D(T(t)), \quad b(t) \equiv b(T(t)), \quad g(t) \equiv g(T(t)), \\ \dot{q}_1(t, z) &= -b(t)q_1^2(t, z) - D(t) \frac{\partial c}{\partial r} \Big|_{r=L}, \quad z \in [0, H], \quad c(t, L, z) = g(t)q_1(t, z), \\ \dot{q}_2(t, r) &= -b(t)q_2^2(t, r) - D(t) \frac{\partial c}{\partial z} \Big|_{z=H}, \quad r \in [0, L], \quad c(t, r, H) = g(t)q_2(t, r), \\ \dot{q}_3(t, r) &= -b(t)q_3^2(t, r) + D(t) \frac{\partial c}{\partial z} \Big|_{z=0}, \quad t \in (0, t_*), \quad c(t, r, 0) = g(t)q_3(t, r), \\ \frac{dT}{dt} &= \frac{\sigma S}{\tilde{c}\rho V} 7 \cdot 10^{-5}(T + 64, 3)(T_e^4 - T^4), \quad T(0) = T_0. \end{aligned}$$

Численное моделирование позволяет выделить на экстракционной кривой участок, соответствующий количеству начального поверхностного водорода, оценить значения энергий активации обратимого захвата и распада гидридных фаз.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 09-01-00439.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Полянский А. М., Полянский В. А., Яковлев Ю. А. — В сб.: Доклады III международной конференции «Взаимодействие изотопов водорода с конструкционными материалами». Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2008, с. 346–353.