

**Н. М. В л а с о в** (Подольск, РОНЦ МГОУ). **Водородная проницаемость полого цилиндра с учетом термодиффузии и термонапряжений.**

Диффузионный поток атомов водорода в полом цилиндре с учетом градиентов концентрации, температуры и термонапряжений в рамках термодинамики необратимых процессов имеет вид

$$j = -D \left( \nabla C + \frac{C \nabla V}{kT} + \frac{C Q \nabla T}{kT^2} \right),$$

где  $D$  — коэффициент диффузии атомов водорода,  $k$  — постоянная Больцмана,  $T$  — абсолютная температура,  $V$  — потенциал взаимодействия (энергия связи) атома водорода с полем температурных напряжений,  $Q$  — теплота переноса. Потенциал взаимодействия  $V$  определяется из выражения [1]:  $V = -(\sigma_{II}/3)\delta v$ , где  $\sigma_{II}$  — первый инвариант тензора температурных напряжений,  $\delta v$  — изменение объема металла при размещении атома водорода. Численное значение и знак  $Q$  находятся из эксперимента. Для циркония и его сплавов (например, циркалой-2) теплота переноса положительна и колеблется в пределах  $(0,056 \div 0,5)$  eV для температурного интервала  $(500 \div 1000)$  K [2]. Положительный знак  $Q$  физически означает, что диффузионный поток атомов водорода также направлен против градиента температурного поля. Таким образом, температурное поле и возникающие при этом термонапряжения переносят атомы водорода в одном направлении.

В качестве иллюстративного примера рассмотрена водородная проницаемость полого цилиндра. Из условия непрерывности диффузионного потока получено уравнение для определения поля концентрации атомов водорода при соответствующих начальном и граничных условиях

$$\frac{1}{D} \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C}{\partial r} + \frac{\nabla(C \nabla V)}{kT} + \frac{Q \nabla(C \nabla T)}{kT^2}, \quad r_0 < r < R, \quad (1)$$

$C = 0$  при  $t = 0$ ,  $C = C_0$  при  $r = r_0$ ,  $C = 0$  при  $r = R$ ,

где  $t$  — время,  $r_0$  и  $R$  — внутренний и внешний радиусы полого цилиндра,  $C_0$  — средняя концентрация атомов водорода на внутренней поверхности полого цилиндра. Остальные обозначения идентичны принятым ранее. В общем случае решение задачи (1) представляет значительные математические трудности. Однако из физических соображений и с позиции математического формализма введены упрощения. Рассмотрено стационарное температурное поле и соответствующие термонапряжения. Они имеют логарифмическую зависимость от радиальной координаты [3]. Такая зависимость упрощает задачу (1), так как  $\Delta V = 0$  и  $\nabla V \sim 1/r$ . Принято также, что температурный перепад по толщине полого цилиндра существенно меньше абсолютного значения средней температуры  $T_0$ , т. е.  $(T_1 - T_2)/T_0 \ll 1$ , где  $(T_1 - T_2)$  есть температурный перепад. Это приводит к следующей математической формулировке задачи (1):

$$\frac{1}{D} \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{1 - \beta_1 - \beta_2}{r} \frac{\partial C}{\partial r}, \quad r_0 < r < R, \quad (2)$$

$C = 0$  при  $t = 0$ ,  $C = C_0$  при  $r = r_0$ ,  $C = 0$  при  $r = R$ ,

где безразмерные параметры  $\beta_1$  и  $\beta_2$  имеют вид

$$\beta_1 = \frac{4\alpha(T_1 - T_2)\mu(1 + \nu)\delta v}{3kT_0(1 - \nu)\ln(R/r_0)}, \quad \beta_2 = \frac{Q(T_1 - T_2)}{kT_0^2 \ln(R/r_0)}.$$

Здесь  $\alpha$  — коэффициент линейного расширения,  $\mu$  — модуль сдвига,  $\nu$  — коэффициент Пуассона. Остальные обозначения встречались ранее. Из решения задачи (2)

получены поле концентрации атомов водорода и соответствующий диффузионный поток через внешнюю поверхность полого цилиндра.

Проведен сравнительный анализ влияния термодиффузии и термонапряжений на водородную проницаемость полого цилиндра. Показано, что для известных экспериментальных данных по величине теплоты переноса термодиффузия является определяющей по сравнению с термонапряжениями. При этом термодиффузия и термонапряжения переносят атомы водорода в одном направлении. В зависимости от направления температурного градиента атомы водорода могут увлекаться или задерживаться полем температуры и соответствующими термонапряжениями.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Теодосиу К.* Упругие модели дефектов в кристаллах. М.: Мир, 1985, 351 с.
2. *Власов Н. М., Зазноба В. А.* Термодиффузия водорода в цирконии с учетом термонапряжений. — ЖТФ, 2009, т. 79, в. 5, с. 49–53.
3. *Тимошенко С. П., Гудьер Дж.* Теория упругости. М.: Наука, 1979, 560 с.