

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 σ_{ii} — первый инвариант тензора температурных напряжений, δv — 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 β_1 и β_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 α — коэффициент линейного расширения, μ — модуль сдвига, ν — 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.