

**Ю. В. Зайка, Е. К. Костикова** (Петрозаводск, ИПМИ КарНЦ РАН). **Моделирование водородопроницаемости сквозь дефект защитного покрытия.**

Снижение проникновения водорода и его изотопов сквозь стенки из конструкционных материалов является важной задачей при решении комплексных проблем хранения и транспортировки водорода, защиты от водородного охрупчивания, контроля содержания трития в защитных системах. Дефекты защитной пленки могут подвергать соответствующую область конструкционного материала прямому воздействию водорода [1]. В статье [2] рассмотрена задача моделирования водородопроницаемости цилиндрического образца радиуса  $L$  и высоты  $H$  в случае, когда диффузия является единственным лимитирующим процессом. На входной поверхности  $z = 0$ , покрытой тонким защитным покрытием, присутствует дефект малого радиуса  $r_0$ . Остальная часть входной поверхности водородонепроницаема, как и боковая поверхность. На выходной стороне  $z = H$  поддерживается вакуум. В начальный момент времени  $t = 0$  образец обезводорожен. Затем на входной стороне скачкообразно повышается давление молекулярного водорода до уровня  $p$ . Если пренебречь переходным процессом, то можно считать, что концентрация растворенного водорода под дефектом поддерживается на уровне  $c_0 = \text{const}$  (находится в равновесии с газообразной фазой по закону Сиверса,  $c_0 \propto \sqrt{p}$ ). Растворенный (атомарный) водород диффундирует к выходной поверхности. С помощью масс-спектрометра регистрируется проникающий поток.

*Диффузионная модель.* Краевая задача с учетом диффузии в объеме [2]:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \left[ \frac{\partial^2 c}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial c}{\partial r} + \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right], \quad r \in (0, L), \quad z \in (0, H), \quad t \in (0, t_*),$$

$$c(t, r, 0) = c_0, \quad r \in [0, r_0], \quad r_0 < L, \quad \frac{\partial c}{\partial z}(t, r, 0) = 0, \quad r \in (r_0, L), \quad t \geq 0,$$

$$c(t, r, H) = 0, \quad r \in [0, L], \quad \frac{\partial c}{\partial r}(t, L, z) = 0, \quad \frac{\partial c}{\partial r}(t, +0, z) = 0, \quad c(0, r, z) = 0.$$

Здесь  $c(t, r, z)$  — концентрация H;  $D$  — коэффициент диффузии. Момент  $t_*$  определяется выходом проникающего потока на стационар. Условие  $c_r(t, +0, z)$  следует из симметрии  $c(t, r, z)$ . Цель состоит в моделировании потока с выходной поверхности:

$$J(t) = -D \int_0^L \frac{\partial c}{\partial z} \Big|_{z=H} 2\pi r dr.$$

Изменения выражения  $J(t)$  с учетом рекомбинации атомов водорода в молекулы на поверхности (в приповерхностном объеме) приведены в последующих разделах.

*Модель с объемной десорбцией.* Вместо  $c(t, r, 0) = c_0$ ,  $c(t, r, H) = 0$  используем

$$\mu sp - bc^2(t, r, 0) = -D \frac{\partial c}{\partial z} \Big|_{z=0}, \quad r \in [0, r_0], \quad bc^2(t, r, H) = -D \frac{\partial c}{\partial z} \Big|_{z=H}, \quad r \in [0, L],$$

$J(t) = \int_0^L bc^2(t, r, H) 2\pi r dr$ . Здесь  $b$  — коэффициент объемной десорбции (эффективной рекомбинации [1]),  $\mu$  — кинетическая константа,  $p$  — давление молекулярного водорода,  $s$  — коэффициент прилипания H к поверхности. Можно учесть различие входной и выходной поверхностей:  $b = b_1$  при  $z = 0$  и  $b = b_2$  при  $z = H$ .

*Поверхностная десорбция.* Вместо  $c(t, r, 0) = c_0$ ,  $c(t, r, H) = 0$  используем

$$\frac{\partial q_0}{\partial t} = \mu sp - bq_0^2(t, r) + D \frac{\partial c}{\partial z} \Big|_0, \quad r \in [0, r_0], \quad \frac{\partial q_H}{\partial t} = -bq_H^2(t, r) - D \frac{\partial c}{\partial z} \Big|_{z=H}, \quad r \in [0, L],$$

$$c(t, r, 0) = gq_0(t, r), \quad c(t, r, H) = gq_H(t, r), \quad J(t) = \int_0^L bq_H^2(t, r) 2\pi r dr.$$

Здесь  $q_0$ ,  $q_H$  — поверхностные концентрации,  $g$  — коэффициент быстрого растворения.

Доклад посвящен результатам численного моделирования.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Писарев А. А., Цветков И. В., Маренков Е. Д., Ярко С. С. Проницаемость водорода через металлы. М.: МИФИ, 2008, 144 с.
2. Zajec B. Hydrogen permeation barrier — recognition of defective barrier film from transient permeation rate. — Int. J. of Hydrogen Energy. 2011, v. 36, p. 7353–7361.