

**ИЗУЧЕНИЕ И МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ПРОЦЕССОВ ДИФФУЗИИ  
ВОДОРОДА В ТИТАНЕ**

Чжан Хунжу

Научный руководитель: профессор Тюрин Ю.И.

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: zhanghongru1993@gmail.com

**STUDY AND SIMULATION OF NON-STATIONARY PROCESSES OF HYDROGEN DIFFUSION IN  
TITANIUM**

Zhang Hongru

Scientific Supervisor: Prof. Tyurin Y.I.

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin Ave, 30, 634050

E-mail: zhanghongru1993@gmail.com

***Abstract.** The behavior of hydrogen in metals is becoming an increasingly multidisciplinary interdisciplinary problem at the intersection of physics and solid state chemistry. The expansion of the range of problems studied is due to the expanding use of metal-hydrogen systems: the accumulation of hydrogen in hydrides and its use as environmentally friendly fuels, the materials science aspects of the use of hydrogen in nuclear, thermonuclear and hydrogen energy, for purifying hydrogen and separating its isotopes. Since the interaction of hydrogen with a metal, including the diffusion of hydrogen, determines the physical and physicochemical properties of materials, it is important to study the kinetic processes in metal-hydrogen systems, including the solution of diffusion problems. In this case, we carried out an experimental study and simulation of the processes of hydrogen diffusion to vacuum from previously flattened hydrogen metal plates of different thicknesses under thermal heating, and compared the results of numerical and analytical modeling with experiment.*

**Введение.** Поведение водорода в металлах становится все более многоплановой междисциплинарной проблемой на стыке физики и химии твердого тела. Расширение круга изучаемых проблем обусловлено расширяющимся использованием систем металл-водород: накопление водорода в гидридах и его использование в качестве экологически чистого топлива, материаловедческие аспекты применения водорода в ядерной, термоядерной и водородной энергетике, для очистки водорода и разделения его изотопов. Поскольку взаимодействие водорода с металлом, в том числе диффузия водорода, определяет физические и физико-химические свойства материалов, то важно изучить кинетические процессы в системах металл-водород, включая решение диффузионных задач. В наших исследованиях основное внимание уделяется процессу термостимулированного газовыделения (ТСГВ) водорода из титанового сплава, мы провели экспериментальное исследование и моделирование процессов диффузионного выхода водорода в вакуум из предварительно насыщенных водородом плоских металлических образцов различной толщины при термическом нагреве, и сопоставление результатов численного и аналитического моделирования с экспериментом.

**Экспериментальные данные.** В рамках серии экспериментов использовался сплав Ti толщиной с 0,15 до 1,05 мм. Насыщение водородом образцов по методу Сиверта (из газовой атмосферы) осуществлялось на установке psi «Gas Reaction Controller» в условиях  $P=2\text{атм}$ ;  $t=60\text{мин}$ ;  $T=600^\circ\text{C}$ .

Для изучения процесса диффузии водорода в образце были выполнены эксперименты по термостимулированному газовыделению (ТСГВ) водорода из образцов в вакуум. Регистрация выхода водорода при ТСГВ осуществлялась квадрупольными масс-спектрометрами.

На рис. 1б представлены экспериментальные результаты и зависимость температуры  $T_{\text{max}}$  достижения максимума ТСГВ от толщины материала для первого и второго пиков.

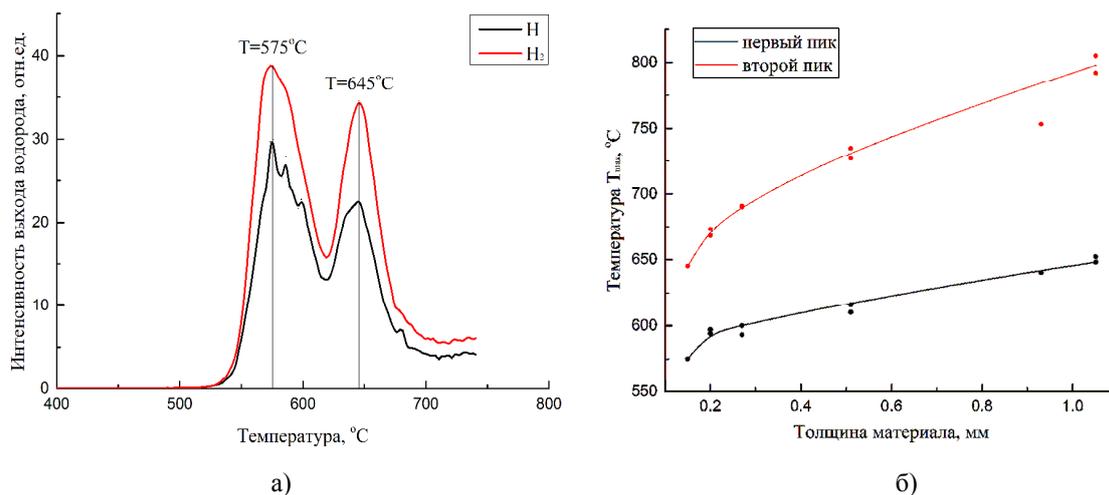


Рис. 1. А) Экспериментальные результаты по термостимулированному газовыделению из Ti при различной толщине образцов  $d = 0,15\text{ мм}$ ; б) Зависимость температуры  $T_{\text{max}}$  достижения максимума ТСГВ от толщины образца титана (насыщение водородом методом Сиверта:  $P=2\text{атм}$ ;  $t=20\text{мин}$ ;  $T=600^\circ\text{C}$ )

**Моделирование процессов термогазовыделения.** Атомы водорода могут диффузионно выходить на поверхность со скоростью  $v_D$ . Атомы водорода рекомбинируют на поверхности в молекулы. Молекулы десорбируются с вероятностью  $v'_{\text{д}}$ . Стадийная модель такого процесса имеет вид [4-5]:

1.  $(\text{H} - \text{L}) \xrightarrow{v_D} \text{H}_2$  - Диффузионный выход атома H на поверхность из невозбужденной связи;
2.  $\text{H}_2 + \text{H}_2 \xrightarrow{k_1} (\text{H}_2)_2$  - Рекомбинация атомов на поверхности; 3.  $(\text{H}_2)_2 \xrightarrow{v'_{\text{д}}} \text{H}_2 + \text{S}$  - Десорбция молекул.

Причиной появления второго максимума на кривой термогазовыделения из титана насыщенного водородом методом Сиверта, может служить разложение гидрида титана при температурах выше  $600^\circ\text{C}$ :  $\text{TiH}_2 \xrightarrow{k(t)} \text{Ti} + 2\text{H}$ .

В этом случае концентрация атомов водорода определяется неоднородным уравнением диффузии:  $\frac{\partial n(x,t)}{\partial x} - D(t) \frac{\partial^2 n(x,t)}{\partial x^2} = \psi(x,t)$ .

На рис. 2 представлены экспериментальная (красная линия) и расчетная (черная линия) плотность потока газовыделения водорода из образца. Видно, что расчетные результаты адекватны экспериментальным данным.

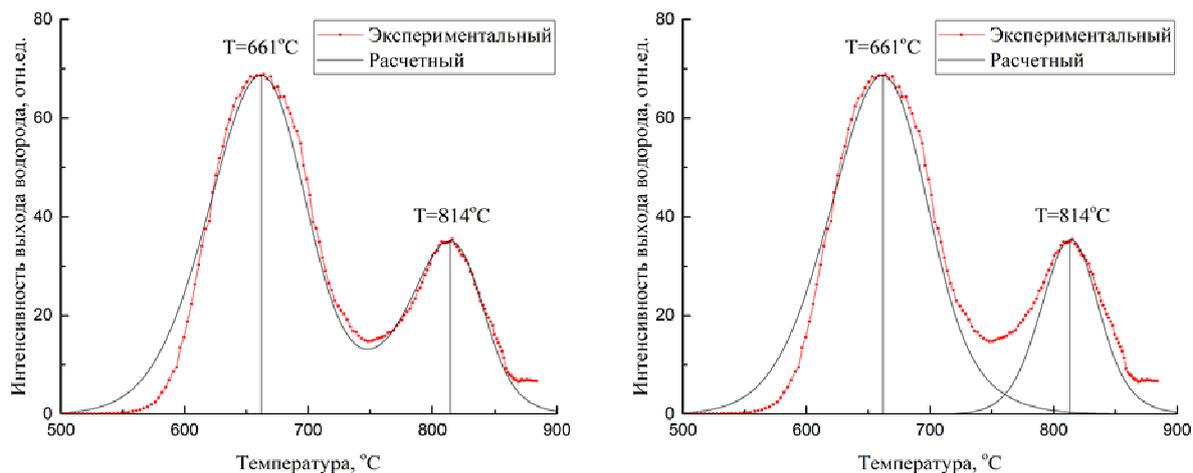


Рис. 2 Расчетные результаты по термостимулированному газовыделению из Ti при параметрах:

$$d=0,93\text{мм}, C=0,33\text{масс}\%, D_0=10^2\text{см}^2/\text{с}, E_0=0,49\text{эВ}, E_d=1,57\text{эВ}, E_a=3,08\text{эВ}$$

**Выводы:** Мы провели экспериментальное исследование и моделирование процессов диффузионного выхода водорода в вакуум из предварительно насыщенных водородом плоских металлических образцов различной толщины при термическом нагреве. Расчетные результаты хорошо соответствуют экспериментальным данным при  $d = 0,15-1,05$  мм; пики газовыделения существенно сдвигаются в низкотемпературную область с уменьшением толщины пластины. Метод программируемого термогазовыделения водорода в условиях линейного нагрева металлов представляет удобный метод определения энергий активации, предэкспоненциальных множителей диффузионных, десорбционных и процессов разложения гидридов.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Денисов Е А, Компаниец Т Н, Юхимчук А А, et al. Водород и гелий в никеле и стали 12X18H10T[J]. Журнал технической физики, 2013, 83(6);
2. Денисов Е А, Компаниец Т Н, Юхимчук А А, et al. Водород и гелий в никеле и стали 12X18H10T[J]. Журнал технической физики, 2013, 83(6);
3. Тюрин Ю. И., Чернов И. П. Аккумулирующие свойства водорода в твердом теле – ISBN 5–283–03186–1 –2000 –Р.213-234;
4. Тюрин Ю. И., Чернов И. П. Радиационно-стимулированный выход водорода из твердых тел – ISBN 5–98298–303–9 –2008 –Р. 206-218;
5. Самарский А. А. Теория разностных схем: учебное пособие. Москва: Наука Физико-математическая литра, –1989 –Р. 616 с.