

**ИЗУЧЕНИЕ И МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ПРОЦЕССОВ ДИФФУЗИИ
ВОДОРОДА В МЕТАЛЛАХ**Чжан Хунжу

Научный руководитель: профессор Ю.И. Тюрин

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
METALS**Zhang Hongru

Scientific Supervisor: Prof. Y.I. Tyurin

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. 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 and radiation 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. То важно изучить кинетические процессы в системах металл-водород, включая решение диффузионных задач. В наших исследованиях основное внимание уделяется процессу термостимулированного газовыделения (ТСГВ) и радиационно-стимулированного газовыделения (РСГВ) 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.

Экспериментальная часть. В рамках серии экспериментов использовался сплав Ni и Pd. Никель насыщен водородом в электролит 0,1 м растворе H₂O - H₂SO₄, плотность тока насыщения 20 мА/см², время насыщения 20 часов, размеры образца 0,3x10x10 мм. Палладий насыщен водородом в 0,1 М растворе H₂O - H₂SO₄, плотность тока насыщения 9 мА/см², время насыщения 20 часов, размеры образца 0,2x10x10 мм.

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

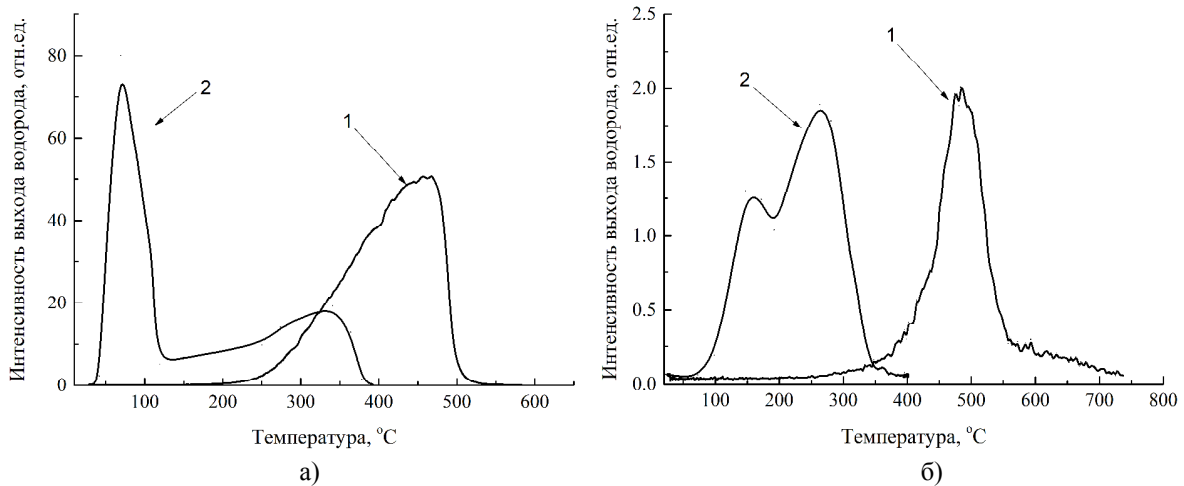


Рис. 1. Плотность потока водорода из палладия (а) и никеля (б) в зависимости от температуры в процессах ТСГВ (1) и РСГВ (2). Скорость нагрева: ТСГВ 1 град/сек., РСГВ 10-15 град/сек. Плотность тока электронного пучка 75 мкА/см², энергия 35 кэВ

На рис. 1 представлены экспериментальные результаты термостимулированного (1) и радиационно-стимулированного (2) выхода водорода из никеля и палладия. Видно, что в случае РСГВ пики газовыделения существенно сдвинуты в низкотемпературную область в Ni и Pd. Сдвиг РСГВ по сравнению с ТСГВ: $\Delta T_{Ni}=475-270=225$ °С, $\Delta T_{Pd}=450-100=350$ °С.

Моделирование процессов радиационно-газовыделения. Диффузионную составляющую опишем одномерным уравнением диффузии. Координата x направлена перпендикулярно боковым граням пластины, начало координат $x = 0$ в центре пластины:

$$\frac{\partial n(x)}{\partial x} = D(t) \frac{\partial^2 n(x)}{\partial x^2}, \quad D(t) = D_0 \exp \left[-\frac{E_a}{k(T_0 + \beta t) + \hbar \omega_p(t)} \right]$$

В этом случае $\omega_p = \sqrt{(2n(e^*)^2)/(m_p \epsilon_o)}$ - совпадает с «плазменной» частотой колебаний изоэнергетических состояний протонов ω_p . При $n_0 = n(x, 0) \sim 10^{23}$ см⁻³ – один протон на один атом Pd, $\hbar \omega_p \sim 0,2$ эВ, что близко к экспериментальным значениям энергии эффективной миграции водорода в Pd при облучении электронами. Выделяющаяся при внешней стимуляции энергия флуктуации электрического поля в объеме V , содержащим протоны с эффективным зарядом $+e^* = eZ^*$, где Z^* - эффективная валентность водорода и концентрацией $n(x, t)$ равна колебательной энергии протонов в V объеме.

Следует учесть, что $\hbar \omega_p$ максимально при $t = 0$, когда максимальна концентрация введенного водорода и в дальнейшем убывает до момента времени $k(T_0 + \beta t) \approx \hbar \omega_p(t) \Rightarrow k(T_0 + \beta t) \approx \hbar \sqrt{(2n(t)(e^*)^2)/(m_p \epsilon_o)}$. Начиная с этого момента времени ($n(t)$ меньше 10^{22-21} см⁻³) следует учесть линейный нагрев образца и возможность появления второго максимума РСГВ, что наблюдается экспериментально.

Используя метод конечных разностей, мы разработали программу на основе MATLAB для имитации этого прогресса. На рис. 2 представлены экспериментальная (красные линии) и расчетная (синие линии) результаты радиационно-десорбции процесса, результат моделирования и эксперимента имеют хорошее согласие.

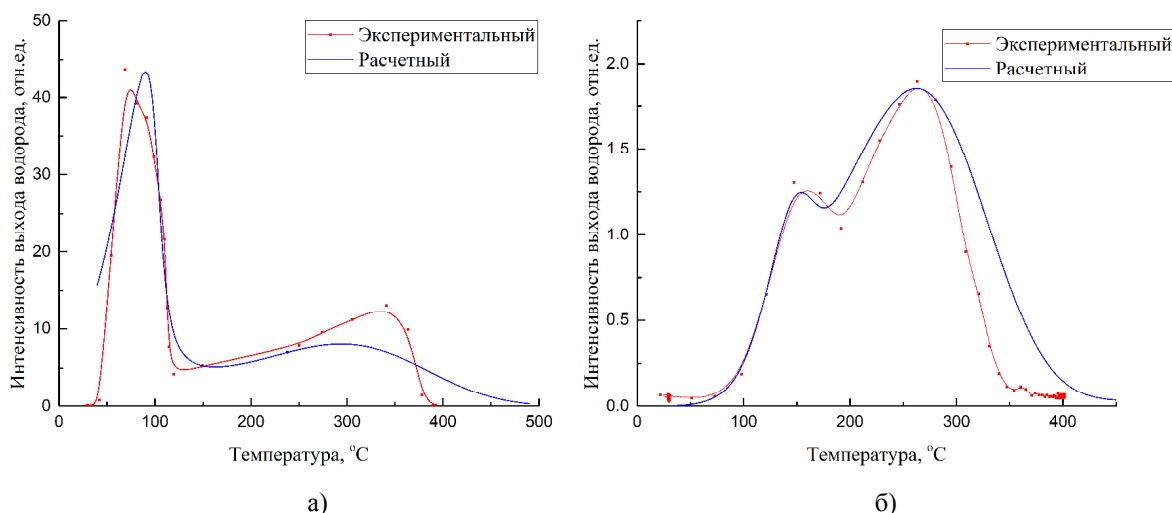


Рисунок 2. Экспериментальные и расчетные результаты по радиационно-стимулированный выход водорода из палладия (а) и никеля (б). Скорость нагрева: 10-15 град/сек. Плотность тока электронного пучка 75 мкА/см², энергия 35 кэВ

Закключение. Мы провели экспериментальное исследование и моделирование процессов диффузионного выхода водорода в вакуум из предварительно насыщенных водородом плоских металлических образцов при термическом и радиационном нагреве. Расчетные результаты хорошо соответствуют экспериментальным данным; в случае РСГВ пики газовыделения существенно сдвинуты в низкотемпературную область по сравнению с ТСГВ. Метод программируемого термо- и радиационно-газовыделения водорода в условиях линейного нагрева металлов представляет удобный метод определения энергий активации, предэкспоненциальных множителей диффузионных и десорбционных.