

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТДС-СПЕКТРА ДЕГИДРИРОВАНИЯ МЕТАЛЛОВ

Н.И. Родченкова, Ю.В. Заика

Институт прикладных математических исследований Карельского научного центра РАН,

Пушкинская 11, 185910 Петрозаводск, Россия

nirodchenkova@yandex.ru, zaika@krc.karelia.ru

Метод термодесорбционной спектрометрии (ТДС) широко используется при исследовании систем металл — водород. Образец нагревают в вакуумной камере, регистрируя десорбционный поток водорода и оценивая кинетические параметры модели. График зависимости

плотности потока от температуры (ТДС-спектр) может содержать несколько пиков, соответствующих различным наборам лимитирующих факторов. В данной работе рассмотрим вариант, когда одним из лимитирующих факторов является диффузия.

Рассмотрим сферическую частицу порошка радиуса $L(t)$, в ней гидридное ядро радиуса $\rho(t)$ (β фаза). Слой толщины $(L - \rho)$ — металл с растворенным водородом (α фаза). Внешний нагрев монотонный (линейный). Критическая концентрация $c_\beta = Q$ не успевает заметно меняться. Все коэффициенты считаем аррениусовскими по температуре. Краевая задача:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 \left(D(T[t, r]) \frac{\partial c}{\partial r} - c(t, r) v(t, r) \right) \right], \quad t \in (0, t_*), \quad r \in (\rho(t), L(t)),$$

$$c(0, r) = A + \frac{B}{r} = \frac{L_0 c_0 - \bar{c} \rho_0}{L_0 - \rho_0} + L_0 \rho_0 \cdot \frac{\bar{c} - c_0}{L_0 - \rho_0} \cdot \frac{1}{r}, \quad r \in [\rho_0, L_0], \quad c_0 \equiv c(0, L_0),$$

$$[Q - \gamma c(t, \rho)] \dot{\rho}(t) = D(T[t, \rho]) \frac{\partial c}{\partial r} \Big|_{\rho(t)}, \quad \rho(0) = \rho_0 < L_0 = L(0), \quad v(t, r) = (1 - \gamma) \frac{\rho^2 \dot{\rho}}{r^2} = \frac{L^2 \dot{L}}{r^2},$$

$$c(t, \rho(t)) = \bar{c} < Q. \quad \dot{\Theta} L^{-2} = -b(T_L) q^2 - D(T_L) \frac{\partial c}{\partial r} \Big|_L, \quad \Theta \equiv q L^2, \quad c(t, L) = g q(t),$$

$$T(t, r) = A^\circ(t) + B^\circ(t) r^{-1}, \quad r \in [\rho(t), L(t)], \quad (1 - \gamma) [\rho_0^3 - \rho^3] = L_0^3 - L^3,$$

$$A^\circ(t) + B^\circ(t) L^{-1}(t) = T_L(t), \quad B^\circ(t) = \kappa \rho^2(t) \dot{\rho}(t). \quad T(t, L) \equiv T_L(t) = T_0 + vt.$$

Здесь $c(t, r)$ — концентрация диффузионно-подвижного водорода в α фазе, $q(t)$ — поверхностная концентрация, $D(t) = D(T(t))$ — коэффициент диффузии, $b(t) = b(T(t))$ — коэффициент десорбции, $v(t, r)$ — скорость движения слоя металла по радиусу ($\dot{V}(r) = \dot{V}(L)$). За начальное распределение принимаем квазистационар $c(0, r) = A + B/r$. Такую гиперболическую аппроксимацию получаем из уравнения диффузии $c_t = D[c_{rr} + 2c_r/r]$ при $c_t/D(t) \approx 0$. На границе раздела фаз поддерживается равновесная концентрация $\bar{c} = \eta Q$, $\eta < 1$. У внешней границы имеем концентрацию $c_0 < \bar{c}$ (из граничного условия при $t = 0$, $c_0 = gq(0)$). Третье уравнение — условие Стефана, определяющее закон движения границы раздела фаз. Далее приводится нелинейное динамическое граничное условие: баланс потоков выхода на поверхность, растворения и диффузии. Распределение температуры считаем квазистационарным. Коэффициенты A° и B° : известна температура $T_L(t)$, а приток тепла к границе раздела фаз соответствует теплпоглощению при распаде гидроида.

Для представленной краевой задачи разработан итерационный вычислительный алгоритм. Учтено распределение частиц по размерам. Установлен диапазон адекватности модели и выделены лимитирующие факторы при различных условиях ТДС-эксперимента.

Работа выполнена при финансовой поддержке Фонда содействия отечественной науке.