

**ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ИЗОТОПОВ
ВОДОРОДА С КОНСТРУКЦИОННЫМИ
МАТЕРИАЛАМИ**

**INTERACTION OF HYDROGEN
ISOTOPES WITH STRUCTURAL
MATERIALS. IHISM-08**

**Четвертая Международная Школа молодых ученых
и специалистов
04-08 июля 2008 г.**

**4-th International School for young scientists
July 04-08, 2008**



Тезисы докладов / Abstracts

Нижний Новгород, 2008

**ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ИЗОТОПОВ ВОДОРОДА
С КОНСТРУКЦИОННЫМИ МАТЕРИАЛАМИ
IHISM-08**

**INTERACTION OF HYDROGEN ISOTOPES
WITH STRUCTURAL MATERIALS
IHISM-08**

Тезисы докладов Четвертой международной школы молодых ученых
и специалистов

(г. Нижний Новгород, 04–08 июля, 2008 г.)

Abstracts of presentations at the Fourth International School
for young scientists

(Nizhni Novgorod July 04–08, 2008)

Тезисы докладов Четвертой международной Школы молодых ученых и специалистов «Взаимодействие изотопов водорода с конструкционными материалами. IHISM-08».

г. Нижний Новгород, 04–08 июля, 2008 г.

Сборник содержит тезисы докладов, представленных на Четвертую международную Школу молодых ученых и специалистов «Взаимодействие изотопов водорода с конструкционными материалами. IHISM-08». Приведены тезисы лекций профессорско-преподавательского состава и докладов молодых ученых и специалистов, связанных с использованием изотопов водорода в энергетике, народном хозяйстве и фундаментальных исследованиях. Доклады представлены по следующим темам: кинетика и термодинамика взаимодействия изотопов водорода с твердыми телами, включая эффекты накопления радиогенного гелия; гидриды и гидридные превращения; структурные превращения и механические свойства; аппарататура и методы исследования.

Book of abstracts of the Fourth international school for young scientists and specialists «Interaction of hydrogen isotopes with structural materials» (IHISM-08).

Nizhniy Novgorod, July 04-08, 2008.

The book includes abstracts of presentations at the 4th International School for young scientists and specialists «Interaction of Hydrogen Isotopes with Structural Materials» (IHISM-08). The lectures of lecturer and presentations of young scientists associated with the use of hydrogen isotopes in power engineering, national economy and basic research are considered. The presentations cover the following areas: kinetics and interaction between hydrogen isotopes and solids including effects of radiogenic helium accumulation; hydrides and hydride transformations; structural transformations and mechanical properties; equipment and research techniques.

- C2 ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ ВОДОРОДОУПРУГОСТИ
А. А. Волкова, Ж. Л. Глухова 84
- C3 ИЗМЕНЕНИЕ ЧИСЛА ЛОКАЛИЗОВАННЫХ СОСТОЯНИЙ В МАТРИЦЕ НАНОКОМПОЗИТА COFeZr-ALO, ВЫЗВАННОЕ ТЕРМИЧЕСКИМ НАВОДОРОЖИВАНИЕМ
А. А. Гребеников, О. В. Стогней, А. В. Ситников 87
- C4 ВЛИЯНИЕ МЕХАНИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ С КАТАЛИЗАТОРОМ НА КИНЕТИКУ ДЕСОРБЦИИ ВОДОРОДА В AlH_3
А. Игнатъева, М. Добротворский, И. Е. Габис, А. А. Войт 93
- C5 ПРОНИЦАЕМОСТЬ ВОДОРОДА ЧЕРЕЗ МНОГОСЛОЙНЫЕ МЕМБРАНЫ
Е. Д. Мареников, И. В. Цветков, А. А. Писарев 96
- C6 ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ВОДОРОДА С МЕТАЛЛОМ И ЕГО СВЯЗЬ С ПЕРЕХОДОМ МЕТАЛЛ-ИЗОЛЯТОР НА ПОВЕРХНОСТИ МЕТАЛЛА
Е. В. Маркин 98
- C7 МОДЕЛИРОВАНИЕ АТОМАРНОЙ СТРУКТУРЫ В ОКРЕСТНОСТИ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В ГЦК И ОЦК МЕТАЛЛАХ И РАСЧЕТ КИНЕТИКИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КОМПЛЕКСОВ ВОДОРОД-ВАКАНСИЯ
Л. В. Селезнева 100
- C8 МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ДЕГАЗАЦИИ ОБРАЗЦОВ НЕРЖАВЕЮЩЕЙ СТАЛИ С ПОКРЫТИЕМ НИТРИДА ТИТАНА (TiN), НАСЫЩЕННЫХ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ
А. В. Степанов, Е. А. Денисов 103
- C9 ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА ИДЕНТИФИКАЦИИ ПАРАМЕТРОВ
И. А. Чернов 105
- C10 ВЛИЯНИЕ ЗАЩИТНЫХ ПОКРЫТИЙ НА КИНЕТИКУ НАКОПЛЕНИЯ ВОДОРОДА В ЦИРКОНИЕВОМ СПЛАВЕ ПРИ ЕГО КОНТАКТЕ С ПЕРЕГРЕТЫМ ВОДЯНЫМ ПАРОМ
П. В. Шестаков, Е. А. Денисов 113
- C11 ИССЛЕДОВАНИЕ ЯВЛЕНИЯ СВЕРХПРОНИЦАЕМОСТИ ИЗОТОПОВ ВОДОРОДА ЧЕРЕЗ МЕМБРАНЫ ИЗ V-ГРУППЫ МЕТАЛЛОВ НА УСТАНОВКЕ «ПРОМЕТЕЙ»
А. Н. Дмитриенко, Р. К. Мусяев, А. А. Юхимчук, Б. С. Лебедев 115
- C12 ФОТОЛИЗ МАЛЫХ МОЛЕКУЛ ВБЛИЗИ ТВЕРДЫХ ПОВЕРХНОСТЕЙ
К. Е. Паикин, В. В. Петрушин 117
- C13 ИССЛЕДОВАНИЕ НАСЫЩАЕМОСТИ СТАЛЕЙ ТЯЖЕЛЫМИ ИЗОТОПАМИ ВОДОРОДА
А. П. Пепеляев, В. М. Изгородин, Ю. В. Игнатъев, Е. Ю. Соломатина 120

С2

ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ ВОДОРОДОУПРУГОСТИ

Анастасия А. Волкова, Жанна Л. Глухова

Донецкий национальный технический университет
a.volkov@mail.ru

Изменение концентрационного поля водорода в твердом теле, обусловленное как градиентом концентрации водорода, так и деформацией этого тела вследствие водородных воздействий, описывается системой уравнений водородоупругости. Это система связанных дифференциальных уравнений в частных производных. Ее решение в аналитическом виде представляет значительные математические трудности. Для решения подобных систем применяются численные методы с использованием ЭВМ.

В данной работе рассмотрен численный способ решения задачи о диффузии водорода в пластине с использованием конечно-разностной схемы представления системы дифференциальных уравнений, описывающих этот процесс. Для одномерной диффузии с изменением концентрации водорода вдоль координаты x система уравнений водородоупругости принимает вид:

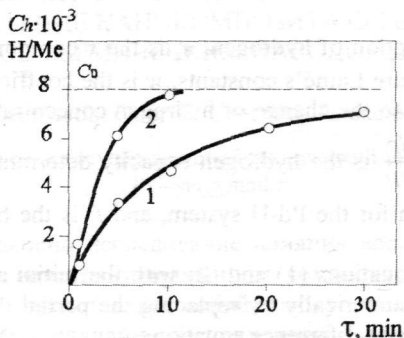
$$\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - \frac{1}{D} \frac{\partial c}{\partial t} - \frac{(3\lambda + 2\mu)}{D} w B_c c \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial u_x}{\partial t} \right) = 0, \quad (1)$$

$$(\lambda + 2\mu) \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} - \frac{(3\lambda + 2\mu)}{D} w \frac{\partial c}{\partial x} = 0 \quad (2)$$

где u_x – проекция вектора перемещения на ось x , λ и μ – коэффициенты Ламе; w – коэффициент линейного расширения металла при растворении водорода; D – коэффициент диффузии водорода, B_c – водородоемкость (определяется по экспериментальным данным; $B_c = \frac{dc}{dP}$, где P – давление водорода в газовой фазе).

Решение полученной системы алгебраических уравнений на ЭВМ, позволяет рассчитывать распределение концентрации водорода в металлической пластине в процессе ее насыщения при различных начальных и граничных условиях. Зная распределение концентрации водорода, мож-

но рассчитывать стрелу прогиба консольно закрепленной пластины и внутренние напряжения в образце.



Временная зависимость концентрации водорода c_H в приповерхностных слоях непроницаемой стороны мембраны: 1 – водородоупругая модель, 2 – диффузия по Фику; температура 100 °С и давление $P_{H_2} = 6 \times 10^3$ Па

CALCULATION OF THE HYDROGEN-INDUCTED ELASTIC DEFORMATION

Anastasiya A. Volkova, Zhanna L. Glukhova

Donetsk National Technical University

a.volkov@mail.ru

The hydrogen concentration over the thickness of the metal plate is caused by the concentration gradient and deformation of the solid. The deformation of the palladium plate upon its single-side saturation with hydrogen (depends on the time, temperature and “hydrogen impact” pressure) is sufficiently well described by the hydrogen-elasticity model based on a set of nonlinear differential equations that describe the hydrogen elasticity on the whole as a general metal-physical phenomenon.

For the one-dimensional case, the system of equations of hydrogen elasticity takes the following form:

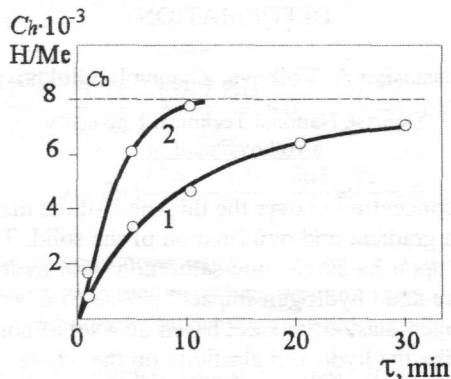
$$\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - \frac{1}{D} \frac{\partial c}{\partial t} - \frac{(3\lambda + 2\mu)}{D} w B_c c \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial u_x}{\partial t} \right) = 0, \quad (1)$$

$$(\lambda + 2\mu) \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} - \frac{(3\lambda + 2\mu)}{D} w \frac{\partial c}{\partial x} = 0 \quad (2)$$

where c is atomic fraction of hydrogen, u_x is the x component of the displacement vector, λ and μ are Lamé's constants, w is the coefficient of linear expansion of the metal due to the change of hydrogen concentration, D is the hydrogen diffusion, $B_c = \frac{dc}{dP}$ is the hydrogen capacity determined from the experimental P - T - c diagram for the Pd-H system, and P is the hydrogen pressure in the gas phase.

The system of equations (1) and (2) with the initial and boundary conditions was computed numerically by replacing the partial differential equations with corresponding finite-difference equations.

This situation is better demonstrated in *Fig.*, which displays the time dependences of c_h near the impenetrable side, according to the hydrogen-elasticity model (curve 1) and Fick's equation (curve 2). Thus, first, the hydrogen-induced concentration stresses and deformations retard the diffusional transport of hydrogen, and, second, the experimental durations do not ensure equalization of the hydrogen concentration over the plate thickness. The diffusional transport of hydrogen is so slow that it is practically interpreted as a stationary state.



Time dependence of the hydrogen concentration c_h in the near-surface regions of the impenetrable side of the plate: (1) hydrogen-elasticity model; (2) Fick's diffusion law ($T = 100^\circ\text{C}$ and $P_{\text{H}_2} = 6 \cdot 10^3 \text{ Pa}$)