
Моделирование ТДС-дегазации пластины

Костикова Е. К.

*Институт прикладных математических исследований Карельского
научного центра РАН, Пушкинская 11, Петрозаводск, 185910, Россия*
e-mail: fedorova@krc.karelia.ru

Экспериментальный метод термодесорбционной спектрометрии (ТДС) является одним из основных при исследовании взаимодействия водорода с твердым телом. Рассмотрим один из простейших вариантов. Пластина из металла или сплава помещается в камеру с газообразным водородом. После насыщения образца растворенным (атомарным) водородом камера вакуумируется, и с помощью масс-спектрометра определяется десорбционный поток. По этой экспериментальной информации судят о тех или иных характеристиках взаимодействия водорода с исследуемым материалом. Остановимся лишь на прямой задаче.

Рассмотрим следующую краевую задачу ТДС-дегазации:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} &= D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}, \quad t > 0, \quad x \in (0, \ell), \quad c(0, x) = \varphi(x), \quad x \in [0, \ell], \\ D \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x=0} &= bc_0^2, \quad D \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x=\ell} = -bc_\ell^2, \quad c_0(t) \equiv c(t, 0), \quad c_\ell(t) \equiv c(t, \ell). \end{aligned}$$

В нелинейной краевой задаче учтены основные лимитирующие факторы: процессы диффузии и десорбции. Здесь $c(t, x)$ — концентрация растворенного водорода, D , b — коэффициенты диффузии и десорбции. Десорбция квадратична: атомы H соединяются в молекулы в приповерхностном объеме. Параметры модели D , b зависят от температуры T . Обычно используют закон Аррениуса: $D(T) = D_0 \exp\{-E_D/[RT]\}$, $b(T) = b_0 \exp\{-E_b/[RT]\}$, $D_0, b_0, E_D, E_b = \text{const}$.

Если начальное насыщение считать, равномерным ($\varphi(x) = \bar{c}$), то решение краевой задачи понимается как обобщенное. Поскольку по постановке эксперимента концентрация симметрична относительно середины пластины и начальное вакуумирование длится некоторое (пусть малое) время, то разумно принять $\varphi(x) = \bar{c} - A(x - \ell/2)^2$, $A > 0$. Константа A определяется подстановкой в граничные условия.

Требуется определить плотность десорбции $J(t) = bc_0^2(t) = bc_\ell^2(t)$ на отрезке времени $[0, t_*]$, $J(t_*) \approx 0$. Эта функция определяется из эксперимента, так что модельный поток $J(t)$ необходим для обоснования и тестирования методов параметрической идентификации. В докладе представлены результаты численного моделирования.