

---

**Численный алгоритм решения краевой задачи  
ТДС-дегидрирования с подвижными границами**

Родченкова Н. И.

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

---

Метод термодесорбционной спектроскопии (ТДС) широко используется при исследовании систем металл-водород. Образец нагревают в вакуумной камере, регистрируя десорбционный поток водорода и оценивая кинетические параметры модели. График зависимости потока от температуры (ТДС-спектр) может содержать несколько пиков, соответствующих различным наборам лимитирующих факторов. Ориентируемся на работы [1], [2], содержащие экспериментальный материал и справочные данные. Математические модели, когда диффузию можно считать относительно быстрой, представлены в [3]. В данной работе диффузия является одним из лимитирующих факторов.

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

**1. Уравнение диффузии.** Обозначим через  $\gamma$  коэффициент объемного сжатия:  $0 < \gamma < 1$ ,  $V \rightarrow \gamma V$ . Внешний слой металла «оседает», плотность потока водорода вдоль радиуса:  $j(t, r) = -D(T)c_r + c(t, r)v(t, r)$ , где  $v(t, r) = L^2\dot{L}/r^2 < 0$  – скорость движения слоя металла по радиусу ( $\dot{V}(r) = \dot{V}(L)$ ). Уменьшение  $L$  инициируется «пропавшим» объемом в результате перестройки решетки на границе раздела фаз:  $(1 - \gamma)[\rho_0^3 - \rho^3] = L_0^3 - L^3 \Rightarrow v(t, r) = (1 - \gamma)\rho^2\dot{\rho}/r^2$ . Уравнение диффузии атомов  $H$  во внешнем слое металла в сферических координатах:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r^2 \left( D(T[t, r]) \frac{\partial c}{\partial r} - c(t, r) v(t, r) \right) \right].$$

**2. Начальное распределение.** Начальные данные – квазистационар:  $c(0, r) = A + B/r$ . Следует из  $c_t = D[c_{rr} + 2c_r/r]$  при  $c_t/D(t) \approx 0$  ( $D(t) = D[T(t)]$ ). Константы  $A, B$ : на границе раздела фаз поддерживается равновесная концентрация  $\bar{c} = \eta Q$ ,  $\eta < 1$ ; у внешней границы  $c_0 < \bar{c}$  (из граничного условия при  $t = 0$ ). Таким образом,

$$c(0, r) = \frac{L_0 c_0 - \bar{c} \rho_0}{L_0 - \rho_0} + L_0 \rho_0 \frac{\bar{c} - c_0}{L_0 - \rho_0} \frac{1}{r}.$$

**3. Уравнение движения границы раздела фаз.** Условие Стефана на подвижной границе (из баланса вещества):

$$[Q - \gamma c(t, \rho)] \dot{\rho}(t) = D(T[t, \rho]) \left. \frac{\partial c}{\partial r} \right|_{\rho(t)}.$$

**4. Нелинейное граничное условие на поверхности** (поверхностная десорбция):  $c(t, L) = gq(t)$ ,  $T_L = T_0 + vt$ ,  $\Theta \equiv qL^2$ ,

$$\dot{\Theta} L^{-2} = \mu s(T_L) p - b(T_L) q^2 - D(T_L) \left. \frac{\partial c}{\partial r} \right|_L.$$

В случае объемной десорбции:  $D(T_L) c_r(t, L) = -b(T_L) c^2(t, L)$ .

**5. Распределение температуры.** Прогрев частиц порошка гидрида значительно быстрее диффузии, поэтому ищем распределение температуры в слое металла в форме квазистационара:

$$\begin{aligned} T[t, r] &= A^\circ(t) + B^\circ(t)/r, \quad r \in [\rho(t), L(t)], \\ A^\circ(t) + B^\circ(t)/L(t) &= T_L(t), \quad B^\circ(t) = \varkappa \rho^2(t) \dot{\rho}(t). \end{aligned}$$

Коэффициенты  $A^\circ$  и  $B^\circ$ : известна температура  $T_L(t)$ , а приток тепла к границе раздела фаз соответствует теплопоглощению при распаде.

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.

Автор выражает благодарность Ю. В. Заике за руководство работой и плодотворные обсуждения. Работа выполнена при финансовой поддержке Фонда содействия отечественной науке.

## Литература

1. Gabis I., Evard E., Voit A., Chernov I., Zaika Yu. *Kinetics of decomposition of erbium hydride*, Journal of Alloys and Compounds **356–357** (2003), 353–357.
2. Колачев Б. А., Ильин А. А., Лавренко В. А., Левинский Ю. В. *Гидридные системы*: справ. изд. М.: Металлургия, 1992.
3. Заика Ю. В., Родченкова Н. И. *Моделирование высокотемпературного пика ТДС-спектра дегидрирования*, Математическое моделирование **18**, № 4 (2006), 100–112.