

Математическое моделирование кинетики поглощения водорода в металлах

К. И. Луданов, Т. И. Братанич

Институт проблем материаловедения им. И. Н. Францевича НАН
Украины, Киев, e-mail: ludanov@ipms.kiev.ua

*Посвящается моей жене, Татьяне Ивановне Братанич,
известному ученому в области аккумуляирования водорода
в металлах, получения нанокompозитов на основе гидридов
металлов и использования водородных технологий
в материаловедении.*

Разработаны аналитические методы расчета параметров кинетики поглощения водорода металлами на основе экспериментальных данных: представлен краткий вывод формул процесса и предложены способы совместного определения интегральных параметров поглощения водорода — максимальной удельной водородоемкости, приведенного диффузионного сопротивления процесса поглощения H_2 и "время активации" поверхности на основе ограниченной выборки (2—3 точки) первичных данных. Этот способ реализуется путем решения систем двух трансцендентных уравнений, в качестве коэффициентов которых использованы экспериментальные данные процесса поглощения водорода.

Ключевые слова: водород, металл, кинетика поглощения, диффузионное сопротивление, водородоемкость, индукционный период, энергия активации.

Введение

Практически все металлы поглощают водород. Некоторые металлы водород гидрирует (например, Fe, Al, Mo, Pt), образуя химические соединения — гидриды. В иных металлах водород растворяется, формируя твердые растворы. Кинетика поглощения водорода металлами в основном определяется процессом его диффузии в образцах, порошках, прессовках или пластинах. Это вызвано тем, что скорость химического взаимодействия, например гидрирования, намного выше скорости диффузии водорода в металлическом образце. Поэтому лимитирующим фактором поглощения H_2 металлом является диффузионное сопротивление потоку водорода на его пути к молекулам кристаллической решетки.

Обзор

Впервые явление поглощения водорода металлами (в палладии Pd) открыл английский ученый Грэм (Т. Gram, 1866). В настоящее время металлы рассматриваются как очень перспективный материал для аккумуляирования и хранения водорода, поскольку он практически взрывобезопасен.

Уже давно определена и последовательность диффузионного распространения водорода в металлах [1]. Сначала молекулы газа H_2 адсорбируются на металлической поверхности, точнее на ее "активных центрах". На них молекулы H_2 диссоциируют на атомы, которые далее движутся под действием градиента концентрации по поверхности образцов к границам

зерен. Затем атомарный водород диффундирует "по линии наименьшего сопротивления": входит в образцы по границам зерен, где сопротивление его движению минимально, и далее атомы Н входят непосредственно в зерна кристаллов по дислокациям. И только потом происходит собственно взаимодействие атомов водорода с молекулами кристаллической решетки.

Известно два механизма поглощения водорода металлом [2]. Все они начинаются с адсорбции молекул H_2 газообразного водорода, граничащего с поверхностью образца (порошка, прессовки или пластины), а точнее, на активных точках поверхности (центрах диссоциации) и их последующей диссоциации на атомы Н. Причем в обоих случаях и на поверхности, и внутри образца металла диффундируют именно атомы Н. В первом случае водород химически не реагирует с металлом, а образует твердый раствор. Во втором — происходит химическая реакция водорода с молекулами металла и его максимальная водородоемкость определяется стехиометрией гидрирования (в соответствии с коэффициентами формулы реакции).

В случае, если водород не вступает с металлом в реакцию, он образует с ним твердый раствор. При этом максимальная концентрация водорода в металле называется растворимостью, значение которой при низких давлениях определяется "законом Сиверта" [1], $H_{\max} = k\sqrt{P_{H_2}}$, где P_{H_2} — давление газообразного водорода над поверхностью образца.

Например, в работе [2] экспериментально установлено, что скорость поглощения водорода в порошке Тi при постоянном давлении водорода в камере экспоненциально уменьшается в зависимости от времени: $v_t = v_0 \exp(-\frac{p}{c} t)$, где p — давление газа; c — константа; t — текущее время процесса. А количество водорода, поглощенного за время t , определяется формулой

$$Q_t = v_0 \theta [1 - \exp(-\frac{p}{c} t)]. \quad (1)$$

Общее количество водорода, которое способен поглотить образец при давлении p , равно $Q_{\max} = v_0 \theta$.

Однако математического вывода и физического анализа этих зависимостей в работе [2] не приведено, не определен механизм поглощения водорода.

В работе [3] представлены первичные экспериментальные данные кинетики поглощения водорода металлическим образцом в координатах водородоемкость—время (рис. 1, *а*) и предварительно обработанные экспериментальные данные в полулогарифмических координатах: по оси ординат—логарифм свободной емкости образца для насыщения водородом, по оси абсцисс — время (рис. 1, *б*). Анализ кривых показал, что в случае, если известна стехиометрия реакции, то есть можно рассчитать H_{\max} , вторая форма представления гораздо более информативна, поскольку позволяет установить, в частности, что в момент времени процесса $t = 10$ мин резко изменяется темп насыщения образца водородом. Это выражено изломом "прямой" в результате изменения условий диффузии. Темп насыщения водородом уменьшается, очевидно, по причине резкого изменения структуры образца вследствие быстрой химической реакции, при которой изменяется диффузионное сопротивление процесса. Тогда как на графике рис. 1, *а*, где представлены первичные данные, этот переход установить очень сложно.

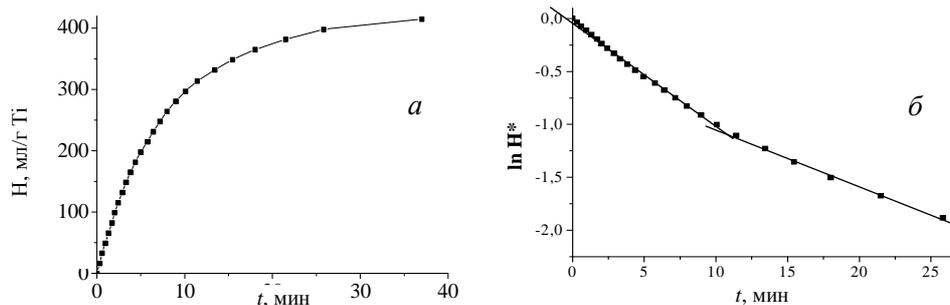


Рис. 1. Первичные данные в координатах водородоемкость—время (а) и пересчитанные в координатах $\ln H^*$ — t данные скорости диффузии при деструктивном гидрировании (773 К, 1 МПа) прессованного слитка TiCu (б).

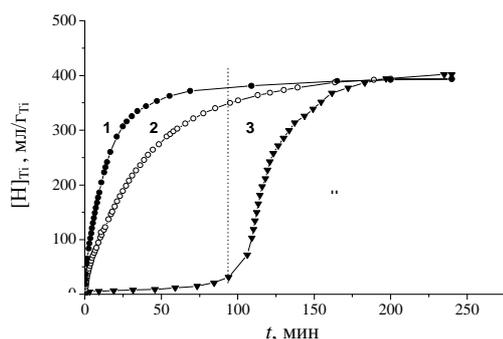


Рис. 2. Скорость поглощения водорода титаном в процессе деструктивного гидрирования Ti_2Ni при температуре 773 К [4]: 1 — прессованный порошок; 2 — прессованная отливка; 3 — пластина.

В полулогарифмических координатах (рис. 1, б) очевидно изменение скорости диффузии водорода, более того, на рисунке несложно установить и момент структурного превращения в образце ($t = 10$ мин). Однако в тех случаях, когда максимальное значение водородоемкости образца неизвестно, представить экспериментальные данные в полулогарифмических координатах невозможно. Кроме того, в рамках логарифмической модели нельзя проанализировать и случай, приведенный на рис. 2 (кривая 3) в работе [4], в котором имеет место так называемый инкубационный период (время активации) t_A поверхности образца ($t_A \neq 0$).

Постановка задачи

Для изучения кинетики поглощения водорода металлами необходимы простые экспресс-методы оценки параметров диффузионного сопротивления процесса R_D и предельной водородоемкости образца C_H , которые объединены в так называемую "постоянную времени" T_0 : $T_0 = R_D C_H$. Для этого, во-первых, следует сформулировать строгую математическую модель процесса поглощения водорода металлом путем диффузии. Априори очевидно [2], что модель кинетики имеет экспоненциальный вид. Во-вторых, необходимо сформировать параметры экспоненциальной кривой кинетики поглощения. И, в-третьих, разработать экспресс-методы оценки параметров кинетической модели на основе ограниченной выборки экспериментальных данных.

На основе анализа первичных данных поглощения водорода металлами (рис. 2) [4] кинетическую кривую поглощения водорода металлами в общем виде можно записать следующим уравнением:

$$H(t) = A(1 - e^{B - t/T_0}), \quad (2)$$

где $H(t)$ — удельная водородоемкость образца; t — текущее время процесса; B — безразмерная величина, характеризующая время активации t_A поверхности образца; T_0 — "постоянная времени" процесса.

Поскольку поток водорода в металле преодолевает ряд диффузионных сопротивлений, разделить которые сложно (если вообще возможно), то основной задачей данной работы является формирование именно обобщенных (интегральных) оценок кинетики: приведенного диффузионного сопротивления процесса R_D . Ведь R_D учитывает и коэффициент диффузии D , и площадь поперечного сечения потока F водорода, и "глубину проникновения" атомов водорода в кристаллическую решетку L . Время активации $t_A = T_o B$ зависит от длительности процесса образования на поверхности образца достаточного количества "центров активации".

Результаты исследования

Краткий вывод формул кинетики поглощения H_2 в металлах

Законы диффузии открыты немецким ученым Адольфом Фиком [3]. Первый закон Фика (1855 г.) записывается так: $j = -D \text{grad}c$, где j — поток вещества через поперечное сечение F ; D — коэффициент диффузии; c — концентрация вещества. Для одномерного случая закон Фика имеет вид $\frac{dm}{dt} = -D \frac{dc}{dx}$. Если перейти к конечным разностям в производной $\frac{dc}{dx}$, то можно записать $\Delta c \sim \Delta H = H_{\max} - H(t)$, где $H(t)$ — средняя водородоемкость по образцу, $H(t) = V^{-1} \int H(x) dV$, и $\Delta x \sim L$, то есть по средней глубине проникновения водорода в образец. Если еще использовать пропорциональность $m \sim \frac{1}{F} \Delta H$, где F — эффективная площадь сечения потока, то в дифференциальном уравнении, полученном из первого закона Фика, можно разделить переменные:

$$\frac{dH}{H_{\max} - H(t)} = D \left(\frac{F}{L}\right) dt.$$

Интегрирование полученного дифференциального уравнения дает формулу, аналогичную (1):

$$\delta H(t) = [H_{\max} - H(t)]/H_{\max} = \exp(-t/T_o), \quad (3)$$

где $\delta H(t)$ — удельная свободная водородоемкость образца, $\delta H(t) = H_{\max} - H(t)$. В безразмерном виде $\delta H(t)/H_{\max} = H^*$ — безразмерная свободная водородоемкость; T_o — "постоянная времени" процесса; $T_o = C_H R_D$; R_D — диффузионное сопротивление процесса поглощения водорода, которое равно $R_D = L/(FD)$, то есть R_D объединяет все физические величины, определенные условно.

Для всей цепочки последовательных диффузионных сопротивлений на пути водорода от поверхности в кристаллическую решетку можно записать

$$R_D = \sum (R_D)_i = \sum [L/(FD)]_i.$$

Из формулы (3) следует и другая зависимость — выражение для текущей водородоемкости образца

$$H(t) = H_{\max} [1 - \exp(-t/T_o)]. \quad (4)$$

Совместное определение параметров кинетики (H_{\max} , R_D)

Обычно в процессах поглощения водорода металлическими порошками параметр $B = t_A/T_o = 0$. В этом случае формула (2) упрощается:

$$H(t) = A(1 - e^{-t/T_o}), \quad (5)$$

где A — максимальная водородоемкость образца; T_0 — величина, равная произведению приведенного диффузионного сопротивления R_D на расчетную водородоемкость образца C_H .

Кривую (3) (рис. 2) можно условно назвать "экспоненциальной кинетической кривой", которая записывается в следующем виде:

$$H(t) = A[1 - \exp(-t/T_0)].$$

Для определения неизвестных параметров кривой A и T_0 по экспериментальным точкам необходимо провести хотя бы два измерения и решить систему двух уравнений с двумя неизвестными:

$$\{ H_1 = A[1 - \exp(-t_1/T_0)],$$

$$\{ H_2 = A[1 - \exp(-t_2/T_0)].$$

Поскольку экспонента — не алгебраическая функция, получаем систему двух трансцендентных уравнений с двумя неизвестными, которая в общем случае не имеет решения и точно решается только в некоторых частных случаях, например при $t_2 = 2t_1$. Если подставить во второе уравнение системы $t_2 = 2t_1$, то получим $\exp(-t_2/T_0) = \exp(-2t_1/T_0) = [\exp(-t_1/T_0)]^2$. Вводя новое обозначение $\exp(-t_1/T_0) = E$, получаем равносильную систему двух уравнений:

$$\{ H_1 = A(1 - E),$$

$$\{ H_2 = A(1 - E^2).$$

Ее анализ показал, что это система двух алгебраических уравнений с двумя неизвестными (A и E), которая имеет решение. Оно может быть получено, например, почленным делением правых и левых частей обоих равенств. В результате имеем

$$H_2/H_1 = \frac{1 - E^2}{1 - E} = 1 + E.$$

Откуда $E = H_2/H_1 - 1 = \exp(-t_1/T_0)$. Из этого равенства, логарифмируя правую и левую части, можно найти значение темпа кинетики или обратной величины "постоянной времени" T_0 :

$$(T_0)^{-1} = \frac{1}{t_1} \ln \left[\frac{H_2 - H_1}{H_1} \right]^{-1}.$$

Преобразуя это выражение, получаем окончательно

$$T_0 = t_1 / \ln \frac{H_1}{H_2 - H_1}. \quad (6)$$

Зная T_0 , легко определить диффузионное сопротивление $R_D = T_0/C_H$, где C_H — расчетная водородоемкость экспериментального образца массой m .

Теперь достаточно просто получить выражение для параметра A : $A = H_{\max}$. Подставляя значение E в систему уравнений, получаем

$$H_{\max} = A = \frac{(H_1)^2}{2H_1 - H_2}. \quad (7)$$

Пример 1

Выберем на крутом участке кинетической кривой процесса поглощения водорода интерметаллидом TiFe [4] при 303 К две экспериментальные точки на кривой 4 ([4], рис. 3), для которых выполняется равенство $t_2 = 2t_1$

($t_1 = 30$ с, $t_2 = 60$ с). Подставим их абсциссу t_1 и ординаты ($mH_1/C_H = 81,1\%$ и $mH_2/C_H = 87,7\%$) в формулы для T_0 и H_{\max} . Получаем их точные значения по формулам $mH_{\max}/C_H = 88,3\%$, $T_0 = 12,0$ с.

Выберем на крутом участке кинетической кривой процесса поглощения водорода интерметаллидом TiFe [4] при 343 К две экспериментальные точки на кривой 3 ([4], рис. 3), для которых выполняется равенство $t_2 = 2t_1$ ($t_1 = 30$ с, $t_2 = 60$ с). Подставим значение их абсциссы t_1 и ординаты ($mH_1/C_H = 69\%$ и $mH_2/C_H = 78,9\%$) в формулы для R_D и H_{\max} . Получаем их точные значения: $mH_{\max}/C_H = 80,6\%$, $T_0 = 16,6$ с.

Вывод: при повышении температуры образца на 40 °С (от 303 до 343 К) скорость поглощения водорода интерметаллидом уменьшается за счет увеличения диффузионного сопротивления R_D (на 38%), максимальная водородоемкость образца при этом уменьшается (на 9%).

Пример 2

Выберем на крутом участке кинетической кривой процесса поглощения водорода прессованным порошком Ti_2Ni при его деструктивном гидрировании при 773 К две экспериментальные точки на кривой 4 (рис. 3, [5]), для которых выполняется равенство $t_2 = 2t_1$ ($t_1 = 25$ мин, $t_2 = 50$ мин). Подставим их абсциссу t_1 и ординаты ($H_1 = 305$ мл/гр и $H_2 = 351,5$ мл/гр) в формулы для T_0 и H_{\max} . Получаем их точные значения: $H_{\max} = 360$ мл/гр, $T_0 = 13,1$ мин.

Выберем на крутом участке кинетической кривой процесса поглощения водорода прессованным слитком интерметаллида Ti_2Ni при его деструктивном гидрировании при 773 К две экспериментальные точки на кривой 4 (рис. 3, [5]), для которых выполняется равенство $t_2 = 2t_1$ ($t_1 = 50$ мин, $t_2 = 100$ мин). Подставим их абсциссу t_1 и ординаты ($H_1 = 273,7$ мл/гр и $H_2 = 347,4$ мл/гр) в формулы для T_0 и H_{\max} . Получаем их точные значения по формулам: $H_{\max} = 356,7$ мл/гр, $T_0 = 38,1$ мин.

Вывод: разница в значениях максимальной удельной водородоемкости образца из прессованного порошка и слитка составляет менее 1% (0,9%), что свидетельствует о высокой точности принятой теоретической модели. Диффузионное сопротивление потоку водорода в прессованном слитке почти в три раза выше, чем в образце из прессованного порошка. Эту оценку легко получить из соотношения

$$R_{D1}/R_{D2} = T_{01}/T_{02} = 38,1 \text{ мин}/13,1 \text{ мин} = 2,9.$$

Совместное определение параметров кинетики R_D , t_A

Предположим, что к числу неизвестных относятся R_D , t_A , а максимальная удельная водородоемкость образца H_{\max} — величина известная. В таком случае, если процесс поглощения водорода в металлах начинается не сразу после контакта с водородом по причине очень большого "времени активации" t_A , то очевидно, что необходимо установить величину t_A , по которой, кстати, можно определить механизм процесса активации поверхности.

Для определения неизвестных необходимо выбрать три точки на крутом участке кинетической кривой (причем на ее выпуклой части): t_1 , t_2 , t_3 , для которых $t_2 - t_1 = \delta t = t_3 - t_2$. Таким образом, получаем три уравнения:

$$H_1 = H_{\max} - \Delta_1, H_2 = H_{\max} - \Delta_2 \text{ и } H_3 = H_{\max} - \Delta_3.$$

Используя координаты средней точки на крутом участке экспоненты, можно записать $\Delta_i = H_{\max} \exp [B - (t_2 \pm \delta)/T_0]$. Из полученного соотношения составим систему уравнений:

$$\begin{cases} \Delta_1 = H_{\max} \exp [B - (t_2 - \delta)/T_0], \\ \Delta_3 = H_{\max} \exp [B - (t_2 + \delta)/T_0]. \end{cases}$$

Подставляя выражения для Δ_i в данную систему уравнений и логарифмируя обе стороны равенств, получаем

$$\begin{cases} B - (t_2 - \delta) = T_0 \ln (\Delta_1/H_{\max}), \\ B - (t_2 + \delta) = T_0 \ln (\Delta_3/H_{\max}). \end{cases}$$

Решая систему уравнений относительно T_0 , получаем

$$T_0 = 2\delta / \ln (\Delta_1/\Delta_3) = 2\delta / \ln \frac{H_{\max} - H_1}{H_{\max} - H_3}. \quad (8)$$

Отсюда можно определить $R_D = T_0/C_H$, зная априори значение C_H .

Вторую неизвестную находим из выражения $B = t_A/T_0$:

$$t_A = t_2 - T_0 \ln \frac{H_{\max}}{\sqrt{(H_{\max} - H_1)(H_{\max} - H_3)}}. \quad (9)$$

Пример 3

Выберем на крутом участке кинетической кривой 3 (рис. 2) процесса поглощения водорода интерметаллидом Ti_2Ni при его деструктивном гидрировании три экспериментальные точки, для которых выполняется равенство $t_2 - t_1 = \delta t = t_3 - t_2$ ($t_1 = 112$ мин, $t_2 = 132$ мин, $t_3 = 152$ мин и $\delta = 20$ мин). Примем, что в этом случае тоже $H_{\max} = 360$ мл/гр. Подставляя в формулу (8) H_{\max} и ординаты H_1 и H_3 двух экспериментальных точек, находим, что "постоянная времени" $T_0 = 15,0$ мин. После чего, подставляя значения t_2 и T_0 , а также ординаты H_1 и H_3 , получим из формулы (9) значение "времени активации" $t_A = t_2 - 25,0 = 107$ мин.

Определение энергии активации процесса поглощения H_2 металлом

Поскольку диффузионное сопротивление R_D в процессе поглощения водорода металлом включает коэффициент диффузии D , значения R_D можно использовать для нахождения энергии активации Q_A , которая определяет зависимость коэффициента диффузии от абсолютной температуры. Эта формула получена шведским ученым Сванте Аррениусом в 1889 г. для оценки скорости химических процессов: $D \sim \exp (-\frac{Q_A}{RT})$, где Q_A — энергия

активации химического процесса (Дж/моль); R — универсальная газовая постоянная ($R = 8,31$ Дж/моль·К); T — абсолютная температура (К).

Теоретический расчет дает следующие значения энергии активации при диффузии водорода в металлах: для Al — 0,47 эВ, Cu — 0,4 эВ, Ag — 0,326 эВ и Au — 0,245 эВ. Но эти значения получены [3] для "совершенной" кристаллической решетки без наличия границ зерен и дислокаций в самой решетке зерен. В реальных случаях "диффузионные" значения Q_A могут сильно отличаться в зависимости от величины зерен, их взаимной ориентации и концентрации дислокаций в кристаллической решетке зерен.

Для определения энергии активации Q_A необходимо иметь хотя бы два экспериментально найденных значений диффузионного сопротивления R_D

при двух различных температурах процесса поглощения водорода образцом (порошок, прессовка или пластина).

Итак, для диффузионного сопротивления можно записать

$$R_D \sim \exp\left(-\frac{Q_A}{RT}\right).$$

А для отношения $R_D(T_1)/R_D(T_2)$ при $T_2 > T_1$ получим

$$R_D(T_1)/R_D(T_2) = \exp\left[\frac{Q_A}{R}\left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right)\right],$$

откуда можно выразить энергии активации Q_A :

$$Q_A = R \frac{T_1 T_2}{T_2 - T_1} \ln \frac{R_D(T_2)}{R_D(T_1)}. \quad (10)$$

Пример 4

Если в результате исследования кинетики процесса поглощения водорода металлическим образцом при двух различных температурах получено два значения диффузионного сопротивления $R_D(T_1)$ и $R_D(T_2)$ для конкретного образца, то по формуле (10) можно оценить величину энергии активации процесса Q_A .

В примере 1 установлены значения "постоянных времени" $T_0 = C_H R_D$ для двух экспериментов (процессов поглощения водорода интерметаллидом TiFe) при различных температурах ($T_1 = 303$ К, $T_2 = 343$ К). В формуле для определения энергии активации Q_A используются не абсолютные значения $R_D(T)$, а их отношение, поэтому можно воспользоваться равенством

$$R_D(T_1)/R_D(T_2) = T_0(T_1)/T_0(T_2),$$

поскольку значение C_H одинаково в обоих случаях.

Таким образом, имеем

$$Q_A = R[(303 \cdot 343)/(343 - 303)] \ln(16,6/12,0) = 7,0 \text{ кДж/моль}.$$

Вывод: анализ полученного результата дает все основания полагать, что водород в образец интерметаллида TiFe входит именно за счет диффузии, поскольку величина энергии активации Q_A процесса диффузии водорода в металлах имеет значения порядка ~ 10 кДж/моль [3].

Выводы

Разработаны аналитические методы расчета параметров кинетики поглощения водорода в металлах по очень ограниченной выборке экспериментальных данных процесса на основе полученной экспоненциальной математической модели кинетики и сформированных затем характерных физических комплексах (параметрах кинетической модели).

На основе оригинальных решений систем двух трансцендентных уравнений предложены экспресс-методы определения параметров кинетической модели: значения максимальной удельной водородоемкости металла H_{\max} , диффузионного сопротивления потоку водорода R_D и времени активации его поверхности t_A по ограниченной выборке экспериментальных данных (2), (3).

Установлена возможность определения величины максимальной удельной водородоемкости H_{\max} металла в случае, если он с водородом образует твердый раствор, что позволяет вычислить коэффициент в формуле Сивертса, а также в случае, если водород гидрирует металл, что позволяет установить массу металла, которая прореагировала с водородом.

Определена энергия активации Q_A процесса поглощения водорода для случая, если диффузионное сопротивление R_D образца получено в экспериментах при двух различных температурах.

Полученные результаты могут быть использованы для оценки параметров и других химических и физических процессов, скорость которых экспоненциально уменьшается со временем.

1. Аб Э. А. Сорбция водорода титаном и цирконием при низком давлении / Э. А. Аб, Р. И. Плотников, Л. А. Хуцишвили // Журн. теор. физики. — 1959. — 29, № 8. — С. 1146—1151.
2. Коган Я. Д. Константы взаимодействия металлов с газами: (Справ.) / [Я. Д. Коган, Б. А. Колачев, Ю. В. Левинский и др.]. — М.: Металлургия, 1987. — 368 с.
3. Никулин В. К. Теория растворения и диффузии водорода в металлах / В. К. Никулин, Н. Д. Потехина // Журн. физ. химии. — 1980. — 14, № 11. — С. 2751—2756.
4. Братанич Т. И. Исследование скорости взаимодействия с водородом порошковых композиций TiFe—Ni / Т. И. Братанич, С. М. Солонин // Современные проблемы физического материаловедения. — К.: Ин-т пробл. материаловедения НАН Украины. — 2008. — Вып. 17. — С. 169—174.
5. Скороход В. В. Термодинаміка, структурні механізми та кінетика деструктивного гідрування титановмісних інтерметалідів / В. В. Скороход, Т. І. Братаніч // Физико-технические проблемы современного материаловедения. В 2-х т. Т. 2. — К.: Академперіодика, 2013. — С. 7—32.

Математичне моделювання кінетики поглинання водню в металах

К. І. Луданов, Т. І. Братаніч

Розроблено аналітичні методи розрахунку параметрів кінетики поглинання водню металами на основі експериментальних даних: представлений короткий висновок формул процесу і запропоновано способи спільного визначення інтегральних параметрів поглинання водню — максимальної питомої воднесмності, наведеного дифузійного опору процесу поглинання H_2 і "час активації" поверхні на основі обмеженої вибірки (2—3 точки) первинних даних. Цей спосіб реалізується шляхом вирішення систем двох трансцендентних рівнянь, в якості коефіцієнтів яких використано експериментальні дані процесу поглинання водню.

Ключові слова: водень, метал, кінетика поглинання, дифузійний опір, воднесмність, індукційний період, енергія активації.

Mathematical modeling of the kinetics of hydrogen absorption by metals

K. I. Ludanov, T. I. Bratanich

The paper developed analytical methods for calculating the parameters of the kinetics of hydrogen absorption of metals on the basis of experimental data: a brief derivation of the process and developed methods of co-determination of integral parameters of the hydrogen absorption — the maximum specific hydrogen capacity, reduced diffusion resistance of uptake of H_2 and "activation time" surface based on limited sampling (points 2—3) of the primary data. This method is implemented by solving systems of two transcendental equations as coefficients which are used by the experimental data of hydrogen absorption.

Keywords: hydrogen, metal, absorption kinetics, diffusion resistance, hydrogen capacity, the induction period, the activation energy.