

МЕТОДОЛОГИЯ И РЕЗУЛЬТАТЫ ИЗУЧЕНИЯ ОСНОВНЫХ СОСТОЯНИЙ И ХАРАКТЕРИСТИК ВОДОРОДА В ГРАФЕНЕ, ГРАФИТЕ И СТАЛЯХ



Нечаев Ю.С., Александрова Н.М., Шурыгина Н.А.,
Черетаева А.О., Денисов Е.А.

ФГУП «ЦНИИчермет им. И.П. Бардина», Москва, Россия

Разработана и применена методология [1-5] эффективной аппроксимации и интерпретации спектров термодесорбции водорода в углеродных и металлических материалах. Методология основана на определенной аппроксимации гауссианами термодесорбционных спектров (ТДС) водорода, полученных с использованием одной скорости нагрева (β), и соответствующей обработке гауссианов (в приближении как реакции первого порядка, так и реакции второго порядка). Это позволяет определить значения энергий активации (Q) и предэкспоненциальных факторов (K_0) констант скорости (K) процессов десорбции, отвечающих ТДС пикам с разными максимальными температурами десорбции (T_{max}).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (Проект # 18-29-19149 мк).

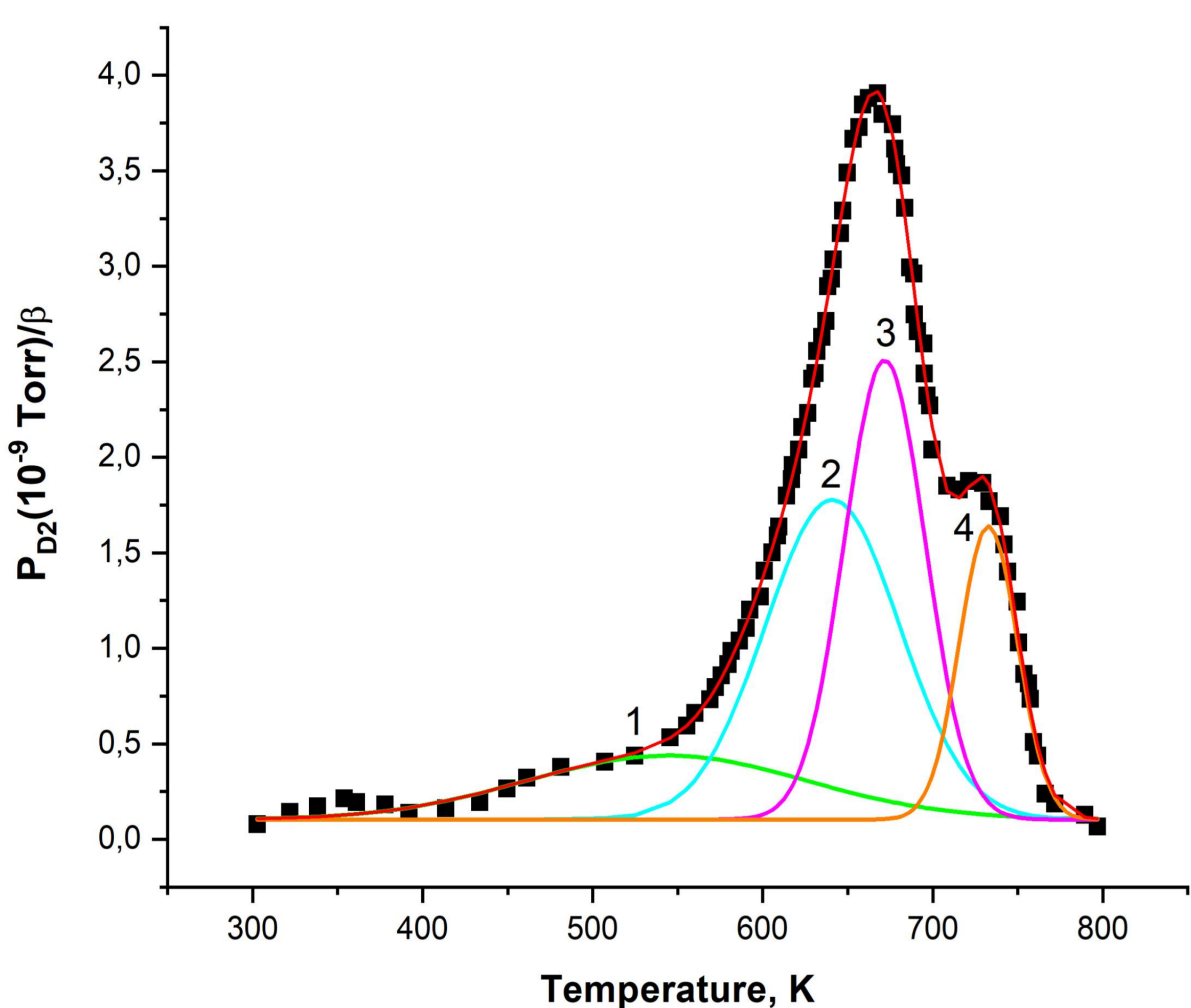


Рис. 1. (Fig. 4a, from [2]) Approximation by four Gaussians of the thermal desorption spectrum ($\beta = 3$ K/s) for deuterium ($m/e = 4$ amu) in hydrogenated epitaxial (on Pt substrate) single layer graphene (H-SLG) with a diamond-like structure (due to sp^3 hybridization); it is in some extent compared with graphane-like structure.

Таблица 1. (Table 6 from [2]) Results of processing of the four Gaussians (Peaks 1-4 (H-SLF)) in FIG. 4a in the approximation of the first-order reaction.

Peak #	T_{max} , K	Q , kJ/mole	K_0 , s^{-1}	$K(T_{max})$, s^{-1}	Q^* , kJ/mole	γ
1	543	24	$8.8 \cdot 10^0$	$3.9 \cdot 10^{-2}$	32	0.15
2	640	72	$5.1 \cdot 10^4$	$6.4 \cdot 10^{-2}$	72	0.40
3	671	130	$1.3 \cdot 10^9$	$1.0 \cdot 10^{-1}$	129	0.30
4	733	224	$1.4 \cdot 10^{15}$	$1.5 \cdot 10^{-1}$	222	0.15

Таблица 2 (из [5])

Характеристики ТДС пиков, отвечающих водородным «ловушкам» в ТРИП стали, железе и стали 20КСХ

Материал	№ ТДС пика	T_{max} , K; (ϕ , K/мин)	$Q_{(eff)}$, кДж/моль	$K_{0(eff)}$, 1/с	$C_{слов}$, ат. %	$\Delta H_{вр}$, кДж/моль
ТРИП (наводорож.), $\epsilon = 0$ %, [1]	1	360 (6,66)	33 ± 5	$1,6 \cdot 10^4$	$1,6 \cdot 10^{-4}$	22 ± 6
ТРИП (наводорож.), $\epsilon = 0$ %, [1]	2	415 (6,66)	28 ± 5	$4,3 \cdot 10^2$	$5 \cdot 10^{-5}$	18 ± 6
ТРИП (наводорож.), $\epsilon = 0$ %, [1]	3	770-720 (6,66)	90 ± 25	$3,5 \cdot 10^5$	$2 \cdot 10^{-5}$	48 ± 25
ТРИП (ненаводорож.), $\epsilon = 0$ %, [1]	4.1	767 (6,66)	210 ± 30	$1,4 \cdot 10^9$	$1,3 \cdot 10^{-5}$	
ТРИП (ненаводорож.), $\epsilon = 0$ %, [1]	4.2	811 (6,66)	220 ± 40	$9 \cdot 10^7$	$9 \cdot 10^{-7}$	
Fe (наводорож.), $\epsilon = 0 - 15$ %, [1]	5.1	338 (6,66)	32 ± 5	$2,4 \cdot 10^2$	$2 \cdot 10^{-5}$	27 ± 6
Fe (наводорож.), $\epsilon = 0 - 15$ %, [1]	5.2	398 (6,66)	31 ± 5	20	$2 \cdot 10^{-5}$	27 ± 6
20КСХ (ненаводорож.), $\epsilon = 0$ %, [19]	6	423 (5,0)	44 ± 5	$6 \cdot 10^2$	$1,6 \cdot 10^{-3}$	33 ± 6
20КСХ (ненаводорож.), $\epsilon = 0$ %, [19]	7	823 (5,0)	90 ± 20	$1 \cdot 10^3$	$3,5 \cdot 10^{-3}$	80 ± 20

ЛИТЕРАТУРА

[1] Yu.S. Nechaev et al. "On characteristics and physics of processes of thermal desorption of deuterium from isotropic graphite at 700-1700 K". // J. Nucl. Mater., 2020; 535:52162.

[2] Yu.S. Nechaev et al. "Studying the thermal desorption of hydrogen in carbon nanostructures and graphite". // Int. J. Hydrogen Energy, 2020; 45:25030-42.

[3] Yu.S. Nechaev et al. "On manifestation and physics of the Kurdjumov and spillover effects in carbon nanostructures, under intercalation of high density hydrogen". // Fullerenes, Nanotubes and carbon nanostructures, 2019.

[4] Ю.В. Заика, Е.К. Костикова, Ю.С. Нечаев «Пики термодесорбции водорода: моделирование и интерпретация». // ЖТФ, 2021, т. 91, в. 2.

[5] Ю.С. Нечаев и др. «Некоторые термодинамические и методические аспекты термодесорбционной спектроскопии водорода в сталях». // ПЧММ, 2013, № 4, с. 5-14.