

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ И ОПТИМИЗАЦИЯ ПРОЦЕССА РАЗДЕЛЕНИЯ ИЗОТОПОВ ВОДОРОДА В СИСТЕМЕ ГАЗ-ТВЕРДОЕ ТЕЛО

Ю. А. Микиша, А. В. Бучирин, В. В. Попов, А. Н. Голубков

РФЯЦ – Всероссийский НИИ Экспериментальной Физики
arkad@triton.vniief.ru

В настоящее время в связи с широким использованием изотопов водорода в науке и технике актуальной является задача совершенствования существующих и создания новых способов эффективного разделения изотопов водорода.

В связи с малыми энергозатратами и простотой технической реализации одним из перспективных методов разделения изотопов водорода является метод газовой хроматографии.

Суть метода заключается в преимущественном поглощении сорбентом более легких изотопов. За счет этого при прохождении смеси изотопов водорода через разделительную колонну происходит обогащение твердой фазой легким, а газовой фазы – тяжелым изотопом.

Был сделан экспериментальный стенд по разделению изотопов водорода методом замещающей газовой хроматографии для подтверждения результатов, полученных в работе [1]. Упрощенная газовая схема стенда изображена на рис. 1.

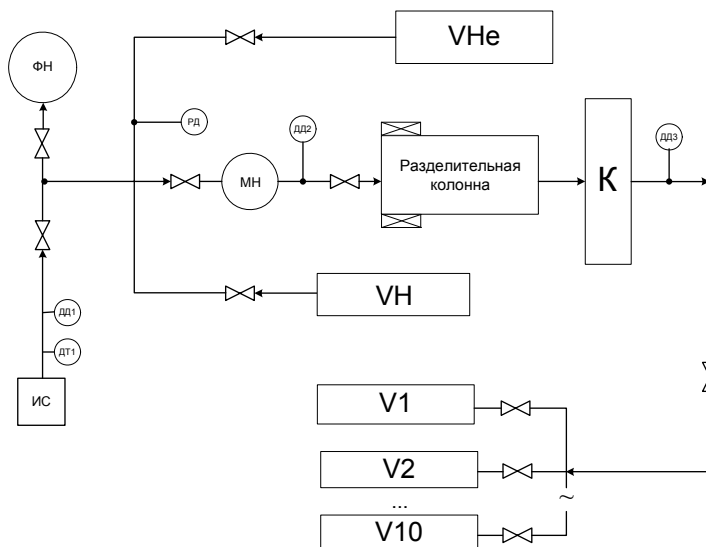




Рис. 1 Газовая схема стенда: ФН – насос форвакуумный; МН – насос мембранный; ИС – источник с исходной смесью; VHe – емкость с гелием; VН – емкости с протием; V1... V10 – емкости для сбора газа; ДД – датчик давления; ДТ – датчик температуры; РД – мановакуумметр; К – катарометр;  – термопара;  – клапан

Непосредственно этап разделения изотопов водорода происходит следующим образом. В разделительную колонну, предварительно заполненную гелием, подается смесь изотопов. После заполнения колонны разделяемой смесью, на вход колонны подается чистый протий и начинается сбор газовых компонент в газосборники.

Для процесса разделения на данном стенде была разработана и программно реализована математическая модель. В основу была положена диффузионно-массообменная теория Ван-Деемтера [2, 3]. Но в отличие от теории Ван-Деемтера, в модели учтена диффузия всех компонентов газовой смеси, более полно учтены процессы сорбции и десорбции. Модель может быть записана в следующем виде:

$$\eta \frac{\partial c_{(D)}(x, t)}{\partial t} = D_{(D)\text{эфф}} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{c_{(D)}(x, t)}{c_{\text{сумм}}(x, t)} \frac{\partial c_{\text{сумм}}(x, t)}{\partial x} \right) - H_{(D)}(x, t),$$

$$\eta \frac{\partial c_{(H)}(x, t)}{\partial t} = D_{(H)\text{эфф}} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{c_{(H)}(x, t)}{c_{\text{сумм}}(x, t)} \frac{\partial c_{\text{сумм}}(x, t)}{\partial x} \right) - H_{(H)}(x, t), \quad (1)$$

$$\eta \frac{\partial c_{(He)}(x, t)}{\partial t} = D_{(He)\text{эфф}} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{c_{(He)}(x, t)}{c_{\text{сумм}}(x, t)} \frac{\partial c_{\text{сумм}}(x, t)}{\partial x} \right);$$

$$H_{(D)}(x, t) = \frac{\partial F_{(D)}(x, t)}{\partial t} \frac{\omega_{\max}}{\mu} (1 - \eta) \rho_{Pd} \delta, \quad (2)$$

$$H_{(H)}(x, t) = \frac{\partial F_{(H)}(x, t)}{\partial t} \frac{\omega_{\max}}{\mu} (1 - \eta) \rho_{Pd} \delta;$$

$$\frac{\partial F_{(D)}(x, t)}{\partial t} = \left(1 - F_{(D)}(x, t) - F_{(H)}(x, t) \right) B_{\text{сорб}(D)} \exp \left(-\frac{E_{a, \text{сорб}(D)}}{RT} \right) \ln \left(\frac{P_{(D)}(x, t)}{P_{\text{равн}(D)}} \right) -$$

$$- F_{(D)}^2(x, t) B_{\text{десорб}(D)} \exp \left(-\frac{E_{a, \text{десорб}(D)}}{RT} \right) \left(\frac{P_{(D)}(x, t)}{P_{\text{равн}(D)}} \right)^{-1}, \quad (3)$$

$$\frac{\partial F_{(H)}(x, t)}{\partial t} = \left(1 - F_{(D)}(x, t) - F_{(H)}(x, t) \right) B_{\text{сорб}(H)} \exp \left(-\frac{E_{a, \text{сорб}(H)}}{RT} \right) \ln \left(\frac{P_{(H)}(x, t)}{P_{\text{равн}(H)}} \right) -$$

$$- F_{(H)}^2(x, t) B_{\text{десорб}(H)} \exp \left(-\frac{E_{a, \text{десорб}(H)}}{RT} \right) \left(\frac{P_{(H)}(x, t)}{P_{\text{равн}(H)}} \right)^{-1}.$$

Все уравнения определены в области $x \in (0, L)$, $t \in (0, t^{\max}]$ (t^{\max} – время окончания эксперимента или этапа эксперимента).

В уравнениях используются следующие обозначения: $D_{(D)\text{эфф}}$, $D_{(H)\text{эфф}}$, $D_{(He)\text{эфф}}$ – коэффициенты эффективной диффузии дейтерия, протия и гелия, $\text{см}^2/\text{с}$; $c_{(D)}(x, t)$, $c_{(H)}(x, t)$, $c_{(He)}(x, t)$ – концентрации дейтерия, протия и гелия в газовой фазе, $\text{моль}/\text{см}^3$; $c_{\text{сумм}}(x, t) = c_{(D)}(x, t) + c_{(H)}(x, t) + c_{(He)}(x, t)$ – общая концентрация всех компонентов газовой смеси, $\text{моль}/\text{см}^3$; η – пористость, отношение свободного объема колонны к полному объему; $H_{(D)}(x, t)$, $H_{(H)}(x, t)$ – величины описывающие, поглощение из газовой фазы в твердую (выделение из твердой фазы в газообразную) дейтерия и протия за счет процессов сорбции и десорбции, $\text{моль}/(\text{см}^3 \cdot \text{с})$; ω_{\max} – максимальная массовая доля водорода в гидриде; μ – молярная масса водорода, $\text{г}/\text{моль}$; ρ_{Pd} – плотность сорбента, $\text{г}/\text{см}^3$; δ – содержание палладия в сорбенте, доли; $F_{(D)}(x, t)$, $F_{(H)}(x, t)$ – степень насыщения дейтерия и протия; $B_{\text{сорб}(D)}$, $B_{\text{сорб}(H)}$ – предэкспоненциальные множители для сорбции, с^{-1} ; $E_{a, \text{сорб}(D)}$, $E_{a, \text{сорб}(H)}$ – энергии активации сорбции для дейтерия и протия, $\text{Дж}/\text{моль}$; $P_{(D)}(x, t)$, $P_{(H)}(x, t)$, $P_{\text{равн}(D)}$, $P_{\text{равн}(H)}$ – парциальные и равновесные давления дейтерия и протия, бар ; R – универсальная газовая постоянная, равная $8,314 \text{ Дж}/(\text{моль} \cdot \text{К})$; T – температура разделительной колонны, К ; $B_{\text{десорб}(D)}$, $B_{\text{десорб}(H)}$ – предэкспоненциальные множители для десорбции, с^{-1} ; $E_{a, \text{десорб}(D)}$, $E_{a, \text{десорб}(H)}$ – энергии активации десорбции для дейтерия и протия, $\text{Дж}/\text{моль}$.

Группа уравнений (1) описывает бародиффузию компонентов газовой смеси в порах сорбента. Пористость в левой части этих уравнений перед производной по времени появляется ввиду того, что концентрация изменяется только в объеме пор. В правой части этих уравнений множители вида $c_{(D)}(x, t)/c_{\text{сумм}}(x, t)$ вычлняют ту часть общего потока, который соответствует данному компоненту. Выражения (2) описывают связь степеней насыщения $F_{(D)}(x, t)$, $F_{(H)}(x, t)$, вычисляемых по уравнениям (3), с величинами $H_{(D)}(x, t)$, $H_{(H)}(x, t)$, описывающими сорбцию и десорбцию изотопов водорода. Система кинетических уравнений (3) описывает процессы сорбции и десорбции для каждого компонента газовой смеси. Первый член в правой части каждого уравнения отвечает за процесс сорбции и имеет достаточно стандартный вид [4]. Второй член в правой части описывает процесс десорбции.

В уравнениях кинетики (3) используется равновесное давление протия, которое можно определить из уравнения Вант–Гоффа:

$$\ln\left(P_{\text{равн}(H)}\right) = -\frac{\Delta H}{RT} + \frac{\Delta S}{R},$$

где ΔH – молярная энтальпия для протия, равная 41,03 кДж/моль [5]; ΔS – молярная энтропия для протия, равная 97,55 Дж/моль [5].

Равновесное давление для дейтерия можно определить, зная равновесное давление для протия и коэффициент разделения α для данной температуры, из выражения [5] $\alpha = \sqrt{P_{\text{равн}(D)}/P_{\text{равн}(H)}}$.

Данные по коэффициенту разделения изотопов водорода на палладию, измеренные в области β -фазы, можно найти в [5]. Для температуры 20–50 °C значение коэффициента разделения изотопов равно $\alpha \approx 2,35$.

В условиях работы стенда (давление газовой смеси до 3–5 бар, температура 20–50 °C) можно считать газы идеальными, тогда связь концентрации и давления, в используемых единицах, можно выразить:

$$P_{(D)}(x, t) = 10c_{(D)}(x, t)RT; \quad P_{(H)}(x, t) = 10c_{(H)}(x, t)RT.$$

Систему уравнений необходимо дополнить начальными и граничными условиями:

$$\eta \frac{\partial c_{(D)}(x, t)}{\partial t} \Big|_{x=0} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{a_{(D)\text{вх}}}{\eta S V_A} - \frac{c_{(D)}(0, t)}{c_{\text{сумм}}(0, t)} D_{(D)\text{эфф}} \frac{\partial c_{\text{сумм}}(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=0} \right),$$

$$\eta \frac{\partial c_{(H)}(x, t)}{\partial t} \Big|_{x=0} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{a_{(H)\text{вх}}}{\eta S V_A} - \frac{c_{(H)}(0, t)}{c_{\text{сумм}}(0, t)} D_{(H)\text{эфф}} \frac{\partial c_{\text{сумм}}(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=0} \right), \quad (4)$$

$$\eta \frac{\partial c_{(He)}(x, t)}{\partial t} \Big|_{x=0} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{a_{(He)\text{вх}}}{\eta S V_A} - \frac{c_{(He)}(0, t)}{c_{\text{сумм}}(0, t)} D_{(He)\text{эфф}} \frac{\partial c_{\text{сумм}}(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=0} \right);$$

$$c_{(D)}(x, 0) = c_{(D)}^{\text{нач}}(x), \quad c_{(H)}(x, 0) = c_{(H)}^{\text{нач}}(x), \quad c_{(He)}(x, 0) = c_{(He)}^{\text{нач}}(x), \quad (5)$$

$$F_{(D)}(x, 0) = F_{(D)}^{\text{нач}}(x), \quad F_{(H)}(x, 0) = F_{(H)}^{\text{нач}}(x);$$

$$V_r c_{(D)}(L, t) = V_r c_{(D)}^{\text{нач}}(L) + S \eta \int_0^t \frac{c_{(D)}(L, \tau)}{c_{\text{сумм}}(L, \tau)} D_{(D)\text{эфф}} \frac{\partial c_{\text{сумм}}(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=L} d\tau,$$

$$V_r c_{(H)}(L, t) = V_r c_{(H)}^{\text{нач}}(L) + S \eta \int_0^t \frac{c_{(H)}(L, \tau)}{c_{\text{сумм}}(L, \tau)} D_{(H)\text{эфф}} \frac{\partial c_{\text{сумм}}(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=L} d\tau, \quad (6)$$

$$V_r c_{(He)}(L, t) = V_r c_{(He)}^{\text{нач}}(L) + S \eta \int_0^t \frac{c_{(He)}(L, \tau)}{c_{\text{сумм}}(L, \tau)} D_{(He)\text{эфф}} \frac{\partial c_{\text{сумм}}(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=L} d\tau,$$

где $c_{(D)}^{\text{нач}}(x)$, $c_{(H)}^{\text{нач}}(x)$, $c_{(He)}^{\text{нач}}(x)$ – начальные распределения молярной концентрации изотопов водорода и гелия в колонне, моль/см³; $F_{(D)}^{\text{нач}}(x)$, $F_{(H)}^{\text{нач}}(x)$ – начальные степени насыщения гидрида изотопами водорода; V_{Γ} – объем газосборника с коммуникациями, см³.

Уравнения (4) описывают граничные условия на входе разделительной колонны и написаны по типу диффузионных уравнений, с той лишь разницей, что в них учитываются потоки изотопов водорода и гелия из внешней емкости внутрь разделительной колонны. В этих уравнениях также может присутствовать член, отвечающий за сорбцию десорбцию изотопов водорода на сорбенте.

Уравнения (5) являются начальными условиями, которые описывают начальные концентрации газов в колонне и начальные степени насыщения сорбента изотопами водорода.

Уравнения (6) описывают в интегральном виде накопление газов в присоединенном газосборнике и связь с концентрациями на выходе колонны. Здесь использовано допущение о незначительности газовых коммуникаций ведущих от разделительной колонны к газосборнику, а также допущение о мгновенности перемешивания газов в газосборнике. В действительности газовые коммуникации имеют некоторую длину и малый диаметр, поэтому многокомпонентная смесь газов течет до газосборника слабо перемешиваясь. Более адекватно было бы моделировать течение многокомпонентной газовой смеси по газовым коммуникациям до газосборника, используя для этого некоторую газодинамическую модель течения вязкого сжимаемого газа [6, 7]. В частности, учитывая длину и малый диаметр газовых коммуникаций, можно использовать односкоростную газодинамическую модель [7].

Для описанной выше математической модели была построена неявная разностная схема [8, 9]. Линеаризация нелинейных уравнений (5) выполнена путем использования, в множителях вида $c_{(D)}(x, t)/c_{\text{сумм}}(x, t)$ концентраций вычисленных на предыдущем слое, что ведет к снижению точности расчетов и ограничениям на размер временного шага. Формально для таких систем нужно использовать метод Ньютона [6]. Для решения системы кинетических уравнений (3) ввиду свойства жесткости данной системы использованы специальные методы [10].

Программная реализация выполнена в среде Delphi 7.0. Входными параметрами для расчета в программе являются $c_{(D)}^{\text{нач}}(x)$, $c_{(H)}^{\text{нач}}(x)$, $c_{(He)}^{\text{нач}}(x)$ – молярные концентрации в разделительной колонне в начальные моменты времени и $c_{(D)}^{\text{нач}}(L)$, $c_{(H)}^{\text{нач}}(L)$, $c_{(He)}^{\text{нач}}(L)$ – начальные молярные концентрации в газосборнике, моль/см³; $a_{(D)\text{вх}}$, $a_{(H)\text{вх}}$, $a_{(He)\text{вх}}$ – потоки протия, дейтерия и гелия на входе колонны, см³/с; t^{max} – время окончания этапа эксперимента, с; V_{Γ} – объем

газосборника, см³; длина и диаметр разделительной колонны, см; T – температура, при которой проходил процесс разделения, К; η – пористость сорбента, доли; E – емкость сорбента по водороду, %; δ – содержание палладия в сорбенте, $D_{(D)\text{эфф}}$, $D_{(H)\text{эфф}}$, $D_{(He)\text{эфф}}$ – доли, эффективные коэффициенты диффузии, см²/с; ΔH , ΔS – энтальпия и энтропия гидридообразования гидрида палладия с участием протия, кДж/моль; α – коэффициент разделения; $B_{\text{сорб}(D)}$, $B_{\text{сорб}(H)}$, $B_{\text{десорб}(D)}$, $B_{\text{десорб}(H)}$ – предэкспоненциальные множители и энергии активации $E_{a, \text{сорб}(D)}$, $E_{a, \text{сорб}(H)}$, $E_{a, \text{десорб}(D)}$, $E_{a, \text{десорб}(H)}$, кДж/моль; количества шагов по времени и пространству для дискретизации области.

Выходными данными программы служат концентрационные профили вдоль разделительной колонны протия, дейтерия, гелия в газовой фазе и степени насыщения гидрида вдоль разделительной колонны изотопами водорода, а также зависимости потоков компонентов газовой смеси от времени и интегральные значения потоков каждого газа в моделируемом газосборнике.

Коэффициенты эффективной диффузии, энтальпия и энтропия гидридообразования, коэффициент разделения, предэкспоненциальные множители и энергии активации непосредственно определяют качественную и количественную картину происходящих процессов.

Оценки для коэффициентов эффективной диффузии были получены на основе экспериментальных данных и изотопного эффекта. Значения энтальпии и энтропии гидридообразования, коэффициент разделения и энергии активации были найдены в литературе [5, 11, 12]. Предэкспоненциальные множители были определены в результате серий вычислений.

Энергии активации сорбции протия $E_{a, \text{сорб}(H)}$ и дейтерия $E_{a, \text{сорб}(D)}$ были взяты равными 28 кДж/моль и 34 кДж/моль. Для процессов десорбции было сделано предположение, что они лимитируются диффузионными процессами в сорбенте, в частности диффузией водорода в чистом металле. Поэтому энергии активации десорбции были выбраны равными энергиям активации диффузии для изотопов водорода в палладии. Энергия активации десорбции для протия $E_{a, \text{десорб}(H)}$ была взята равной 21,8 кДж/моль, для дейтерия $E_{a, \text{десорб}(D)}$ 20 кДж/моль. Предэкспоненциальные факторы были подобраны в процессе вычислений при сравнении результата с экспериментальными данными и примерно составляют для сорбции $B_{\text{сорб}(D)} = 80 \text{ с}^{-1}$, $B_{\text{сорб}(H)} = 180 \text{ с}^{-1}$, для десорбции $B_{\text{десорб}(D)} = 970 \text{ с}^{-1}$, $B_{\text{десорб}(H)} = 450 \text{ с}^{-1}$ для дейтерия и протия, соответственно. Была проведена оценка значений коэффициентов диффузии с учетом перепада давлений на входе в колонну и на выходе из нее. Для этого по перепаду давлений был найден градиент концентрации, значение которого было подставлено в выражение для потока

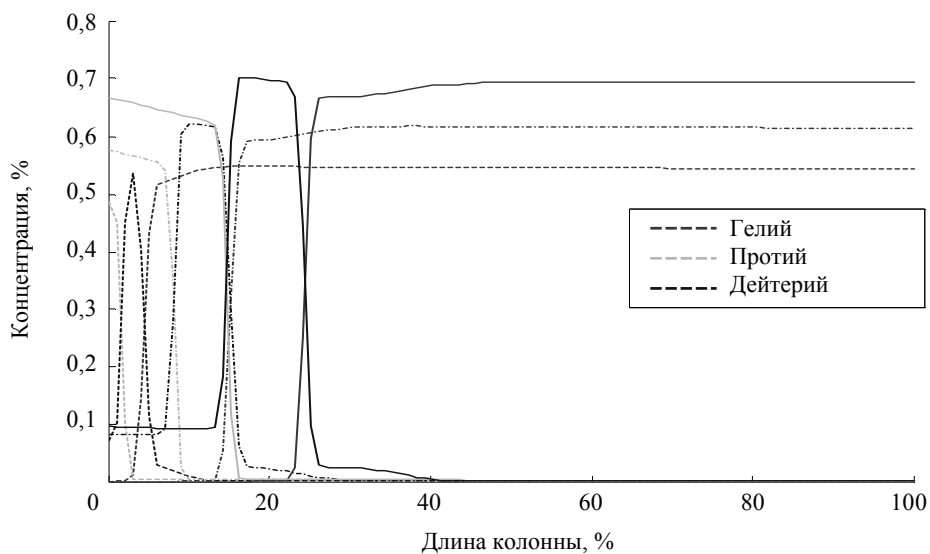
(в предположении, что процесс диффузии в порах установился во времени), значение которого на входе известно. В нашем случае брались данные во время вытеснения газовой смеси протием. На данном этапе сорбент в достаточной степени насыщен, и процесс диффузии газа в порах можно считать медленно изменяющимся по времени. Более точные оценки можно провести, осуществляя продувку колонны гелием, протием, дейтерием, после того как процесс станет стационарным. Оценки коэффициентов диффузии с учетом изотопного эффекта (считаем, что коэффициенты пропорциональны корню квадратному из отношения масс) были получены следующие: для гелия $\sim 1250 \text{ см}^2/\text{с}$, для протия $\sim 2500 \text{ см}^2/\text{с}$, для дейтерия $\sim 1767 \text{ см}^2/\text{с}$.

При расчете варьировались коэффициенты, в основном предэкспоненциальные множители, с целью получения совпадения расчетных данных по объемам газов в газосборниках на выходе из разделительной колонны с экспериментальными данными. Получено достаточно хорошее совпадение результатов, поэтому можно считать, что модель и использованные параметры качественно и количественно описывают процессы, происходящие при разделении изотопов. Концентрационные профили и профили степеней насыщения в различные моменты времени позволяют глубже понять происходящие процессы. Серии расчетов с использованием модели и определенных параметров позволяют в дальнейшем оптимизировать режимы работы экспериментального стенда.

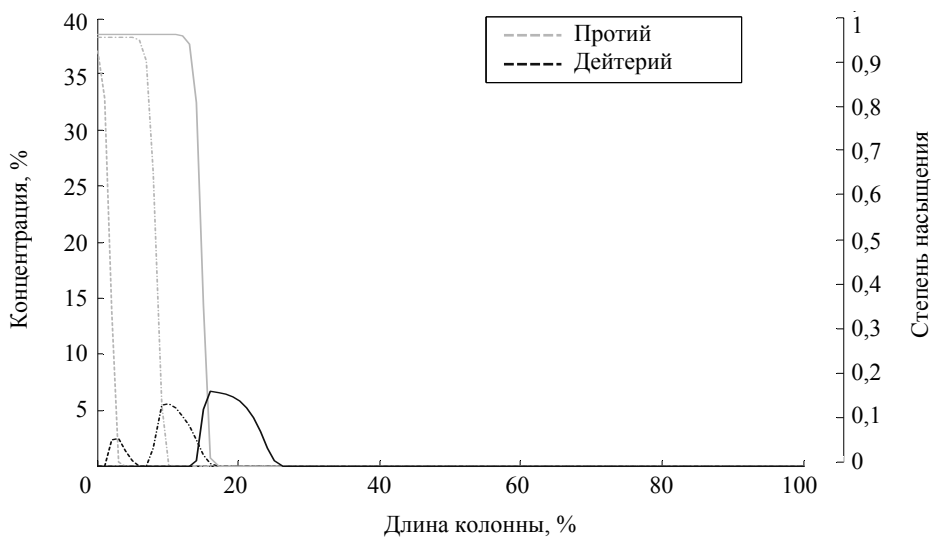
Результатами расчетов являются концентрационные профили протия, дейтерия и гелия на различных этапах процесса разделения. Начальная концентрация дейтерия в смеси составляла 9 %, за 100 % принята суммарная концентрация компонентов в объеме, состоящем из объемов гелия, протия и дейтерия в разделительной колонне на момент ее полного заполнения. На рис. 3 представлены концентрационные профили протия, дейтерия и гелия в газовой фазе в разделительной колонне и в твердой фазе при заполнении разделительной колонны смесью дейтерия и протия для трех различных последовательных моментов времени.

Из рис. 2 видно, что колонна заполняется смесью протия и дейтерия на третью часть длины, по окончании подачи смеси сорбент полностью насыщается водородом. Разделение изотопов происходит уже на стадии заполнения колонны, благодаря различной кинетике сорбции протия и дейтерия. Большая часть протия поглощается сорбентом, образуя гидрид палладия, более тяжелый изотоп, дейтерий, концентрируется в газовой фазе.

На рис. 3 изображены концентрационные профили по длине колонны протия, дейтерия и гелия в газовой фазе и в твердой фазе при заполнении первого газосборника. На рисунках видно, как происходило смещение концентрационных профилей и изменение их формы при сборе компонентов газовой смеси в газосборник с одновременным заполнением разделительной колонны чистым протием.

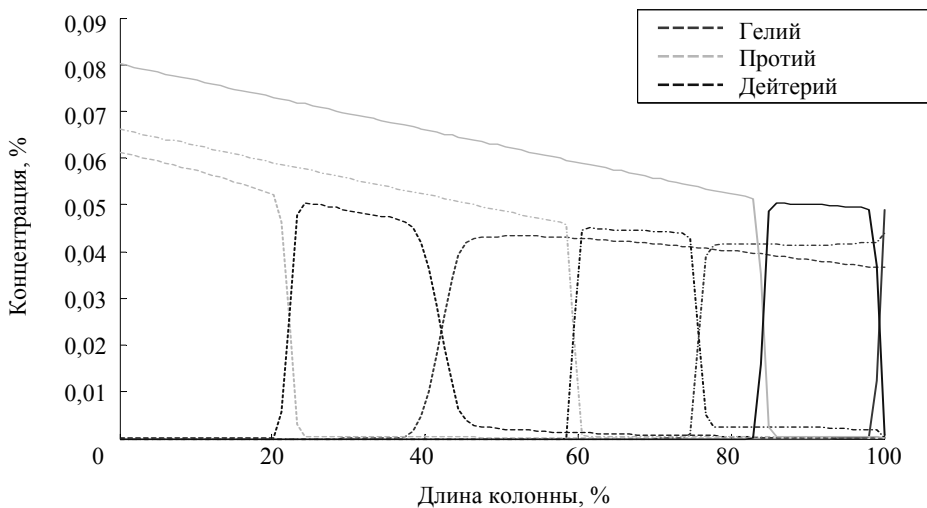


а

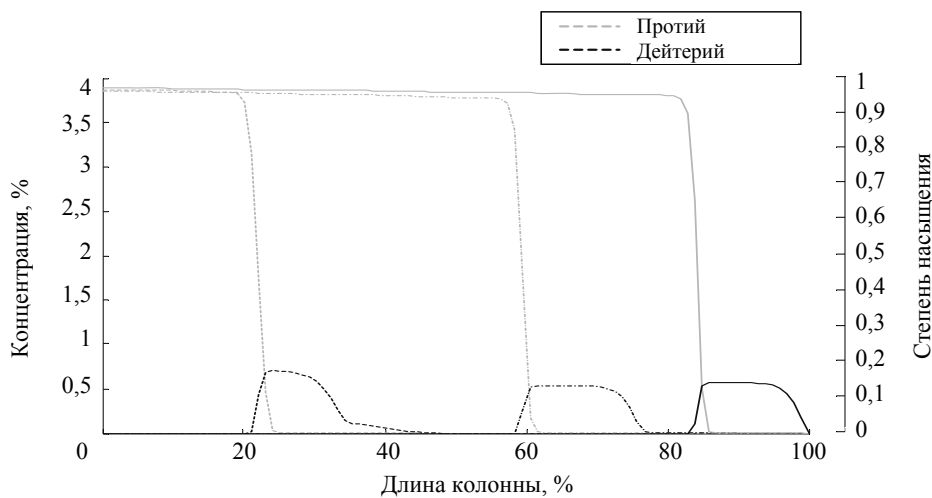


б

Рис. 2. Концентрационные профили протия, дейтерия и гелия вдоль колонны в начальный момент заполнения колонны (пунктирная линия), в момент времени, соответствующий наполовину заполненной колонне, (штрихпунктирная линия) и в момент окончания заполнения колонны (сплошная линия): а – в газовой фазе, б – в твердой фазе



а



б

Рис. 3. Концентрационные профили протия, дейтерия и гелия вдоль колонны в начальный момент заполнения первого газосборника (пунктирная линия), в момент времени, соответствующий наполовину заполненного газосборника, (штрихпунктирная линия) и в момент окончания заполнения первого газосборника (сплошная линия): а – в газовой фазе, б – в твердой фазе

На рис. 4 а изображены концентрационные профили вдоль колонны для протия, дейтерия и гелия в газовой фазе и в твердой фазе при заполнении второго газосборника. К началу заполнения второго газосборника большая часть дейтерия концентрируется на выходе разделительной колонны. Благодаря незначительному размыванию концентрационного профиля и значительной, по сравнению с протием, скорости десорбции, можно собрать дейтерий с высокими степенью разделения и степенью извлечения.

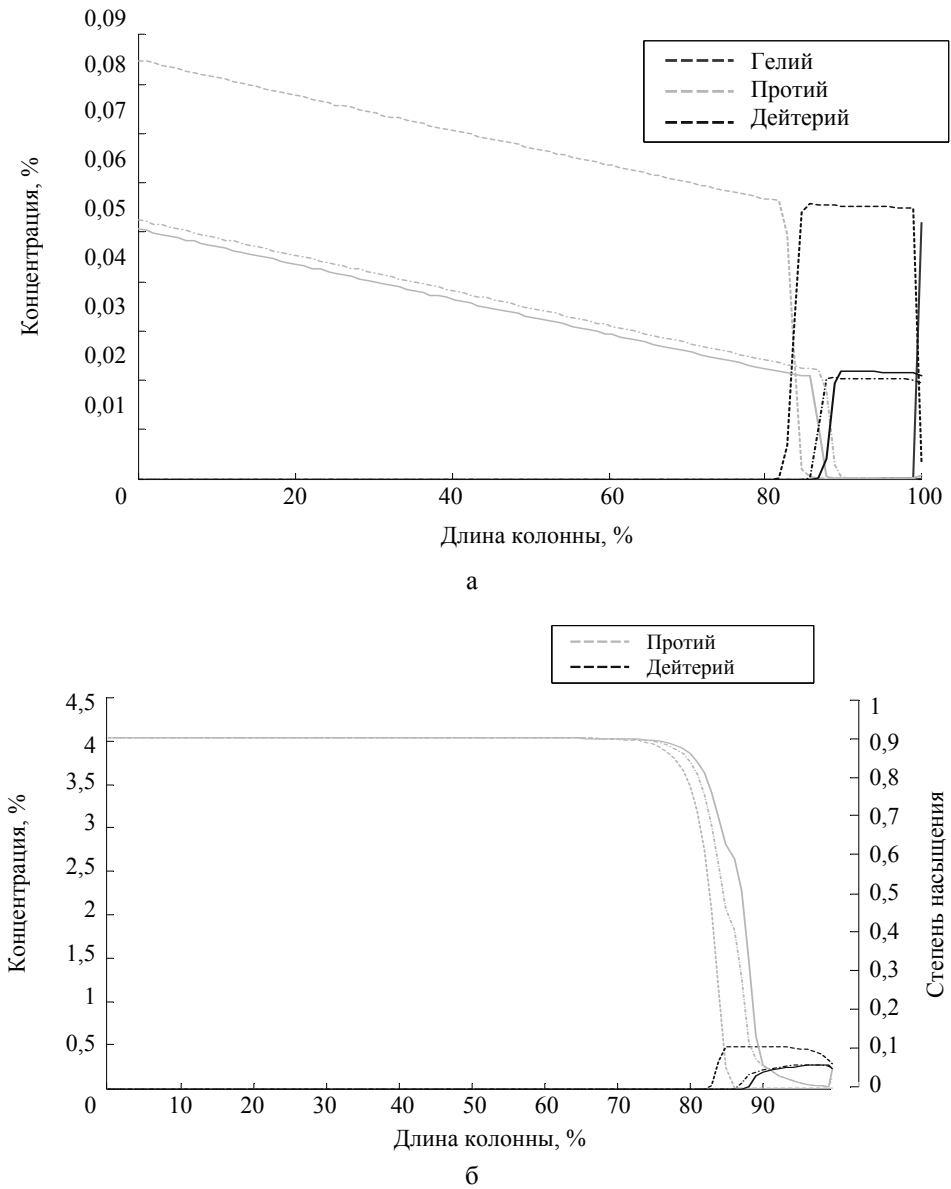


Рис. 4. Концентрационные профили протия, дейтерия и гелия вдоль колонны в начальный момент заполнения второго газосборника (пунктирная линия), в момент времени, соответствующий наполовину заполненного газосборника, (штрихпунктирная линия) и в момент окончания заполнения второго газосборника (сплошная линия): а – в газовой фазе, б – в твердой фазе

Результаты, полученные с использованием математического моделирования, хорошо согласуются с экспериментальными данными. Результаты расчетов объемов дейтерия и протия в соответствующих газосборниках, полученных с помощью модели и эксперимента, приведены на рис. 5.

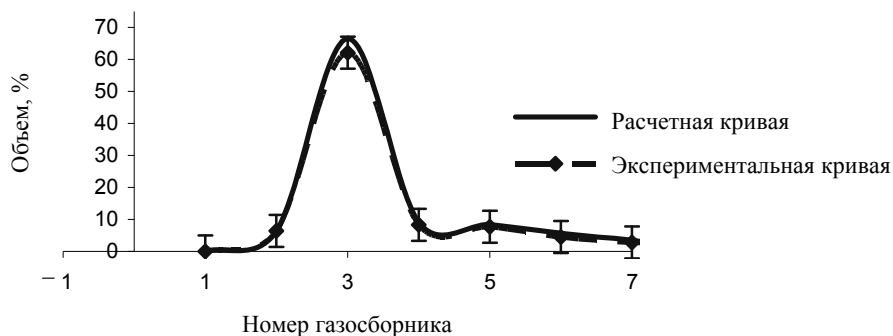


Рис. 5. Распределения объемов дейтерия по соответствующим газосборникам, полученные из расчетов диффузионно-массообменной модели (сплошная линия) и экспериментальных данных (штриховая линия)

Заключение

В работе представлены результаты математического моделирования процесса разделения изотопов водорода в системе газ-твердое тело. В результате обработки экспериментальных данных были определены предэкспоненциальные множители, используемые в уравнениях, описывающих процессы сорбции и десорбции, смоделированы концентрационные профили и профили степеней насыщения в различные моменты времени, получены распределения компонентов газовой смеси по газосборникам хорошо согласующиеся с экспериментальными данными.

Список литературы

1. Lässer R., Jones G., Hemmerich J. L., Stagg R., Yorkshades J. The Preparative Gas Chromatographic System for the JET Active Gas Handling System—Inactive Commissioning. *Fusion Technology*, 28. 1995. P. 681–686.
2. Вяхирев Д. А., Шушунова А. Ф. Руководство по газовой хроматографии. – М.: Высш. шк., 1987.
3. Яшин Я. И. Физико-химические основы хроматографического разделения. – М.: Наука, 1976.
4. Smith, K. C., Zheng Y., Fisher T. S., Mudawar I., Pourpoint T. L. Simulation of High-Pressure Metal Hydride Systems, 19th National & 8th ISHMT-ASME Heat and Mass Transfer Conference, January 3–5, 2008. – JNTU Hyderabad, India, Paper No: US-53, 2008.
5. Водород в металлах 2. Прикладные аспекты. – М.: Мир, 1981.
6. Самарский А. А., Попов Ю. П. Разностные схемы газовой динамики. – М.: Наука, 1975.

7. Нигматулин Р. И. Динамика многофазных сред. – М.: Наука, 1987.
8. Самарский А. А. Теория разностных схем. – М.: Наука, 1983.
9. Самарский А. А., Михайлов А. П. Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры. – М.: Физматлит, 2005.
10. Ракитский Ю. В., Устинов С. М., Чернолуцкий И. Г. Численные методы жестких систем. – М.: Наука, 1979.
11. Эммануэль Н. М., Кнорре Д. Г. Курс химической кинетики. – М.: Высшая школа, 1984.
12. Антонова М. М. Свойства гидридов металлов. Справочник. – Киев: Наукова думка, 1975.