

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДИФфуЗИИ ВОДОРОДА В ПАЛЛАДИЕВО-СЕРЕБРЯНЫХ НАНОПЛЕНКАХ

А.М. Игошкин

*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, 630090, Новосибирск,
Россия*

Водород является одним из самых важнейших химических продуктов и активно используется в ряде областей промышленности: химической, металлургической, нефтехимической, а также в различных энергетических приложениях. При этом более 90% всего водорода добывается термохимическими методами (пиролиз, паровая конверсия, частичное окисление) из природных источников (природный газ, нефть, уголь). В таких способах добычи промежуточным продуктом является газовая смесь, из которой с помощью водородопроницаемых мембран выделяется водород. Одними из лучших для этих целей являются мембраны на основе палладия и его сплавов. В частности – они обладают высокой селективностью и проницаемостью по сравнению с другими материалами (керамические, полимерные, углеродные мембраны). Для нанесения металлических покрытий водородопроницаемых мембран самыми актуальными являются различные методики физического осаждения из газовой фазы (электротермическое напыление, магнетронное напыление). Они позволяют очень точно контролировать толщину получаемых металлических пленок и их состав. В данный момент актуальной является задача отыскания таких условий напыления металлических мембран, при которых достигаются наилучшие показатели параметрами водородопроницаемости и селективности.

В реальных условиях эксперимента эта задача является чрезвычайно комплексной и многоуровневой. В частности, мембраны на основе палладия и его сплавов имеют многослойную структуру: они состоят из пористой подложки, буферного слоя и нанесенной на него тонкой пленки из палладия или его сплава, с помощью которой и происходит отделение водорода от смеси. Остальная конструкция предназначена для того, чтобы обеспечить механическую стабильность очень тонкого металлического слоя. В таких условиях водородопроницаемость и селективность всей мембраны будет зависеть от огромного множества факторов, которые очень не просто анализировать. В таких условиях для того, чтобы выяснить влияние технологических условий на непосредственно свойства пленки из палладиевого сплава, оказывается необходимым использование атомистических расчетных методик. Для реализации данной цели одним из наиболее мощных является метод молекулярной динамики: несмотря на свои ограничения (малые времена и нанометровые масштабы моделирования) он позволяет в ряде случаев получить реалистичные зависимости структуры пленок от технологических условий. Также с помощью этой методики можно изучать взаимодействие водорода с металлом в системах с большим числом дефектов – данные получаются напрямую из траекторий частиц, поэтому расчета многочисленных активационных барьеров для диффузии в таких системах не требуется. Такой подход также известен и дал хорошие результаты. При этом в открытом доступе отсутствуют работы, в которых рассматривалась бы комбинация обоих методик – моделирование осаждения наноструктуры и транспорта водорода в ней. Таким образом постановка задачи, предложенная в работе, является уникальной, ранее не реализованной.

Ранее автором было проведено моделирование осаждения палладиево-серебряных тонких пленок на серебряную подложку [1]. Исследована зависимость различных характеристик получаемых покрытий от их элементных композиции и температур подложек в

процессе формирования. На данном этапе работы проведено моделирование диффузии атомов водорода в полученных наноструктурах [1]. Исследовано влияние элементного состава и температуры формирования на водородопроницаемость палладиево-серебряной пленки при различных концентрация водорода в ней.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №18-32-01059 мол_а.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Igoshkin A.M.** Molecular Dynamics Study of the Deposition of Palladium-Silver Films on a Silver Substrate // Journal of Structural Chemistry. 2019. Vol. 60, No 8. P. 1234–1242.