

УДК 538.9

**К. В. Зайцева<sup>\*</sup>, А. А. Юрьев, Н. И. Сидоров**

Институт металлургии УрО РАН, г. Екатеринбург

*\*ms.great28@mail.ru*

## ПЕРВОПРИНЦИПНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМЫ ВАНАДИЙ–ВОДОРОД, ВЛИЯНИЕ ПРИМЕСЕЙ КИСЛОРОДА И СЕРЫ НА ПРОНИЦАЕМОСТЬ

Работа посвящена исследованию проницаемости и диффузии атомов водорода в чистом ванадии и в ванадии с примесями кислорода и серы методом первопринципной молекулярной динамики в температурном интервале от 500 до 900 К. Рассчитаны парциальные функции радиального распределения атомов при наличии и отсутствии водорода и проанализирован характер движения и характер ближнего порядка.

*Ключевые слова:* проницаемость водорода, метод первопринципной молекулярной динамики, суперячейка, функция радиального распределения атомов, ближний порядок, диффузия, проницаемость водорода

**K. V. Zaitseva, A. A. Yuriev, N. I. Sidorov**

## AB INITIO MODELING HYDROGEN DIFFUSION THROUGH PURE VANADIUM

The work is devoted to the study of the permeability and diffusion of hydrogen atoms in pure vanadium and in vanadium with oxygen and sulfur impurities by the method of first-principle molecular dynamics in the temperature range from 500 to 900 K. The partial functions of the radial distribution of atoms in the presence and absence of hydrogen are calculated and the nature of the motion and the nature of the short-range order are analyzed.

*Keywords:* the permeability of hydrogen, method of first principle molecular dynamics, SuperCell, function of radial distribution of atoms, short range order, diffusion, hydrogen permeability

**Т**радиционные источники энергии, такие как нефть, газ и уголь, являются невозобновляемыми природными ресурсами, а их использование чревато такими последствиями, как парниковый эффект

и кислотные дожди. В связи с этим все большее количество стран в своей энергетической политике обращает внимание на альтернативные источники энергии. Одной из перспективных является водородная энергетика: использование водорода в качестве топлива для топливных элементов на основе твердополимерных электролитов, который должен иметь чистоту не ниже 99,999 %.

В настоящее время наиболее перспективным способом получения сверхчистого водорода считается процесс разделения с использованием металлических мембран на базе палладия или ванадия. Экспериментальные методы не могут в полной мере описать детали взаимодействия водорода с элементами матрицы.

Работа посвящена первопринципному исследованию проницаемости и диффузии атомов водорода в чистом ванадии и ванадии с примесями кислорода и серы. С помощью программного пакета SIESTA, в котором реализована *ab initio* молекулярная динамика, промоделированы супер-ячейка 128 атома ванадия с атомом и молекулой водорода при температурах 500, 900 К. Для каждой системы было промоделировано 1000 шагов, один шаг равнялся 0,1 фс. Был выбран достаточно полный базис DZP (двухэкспоненциальный базис). Далее была сделана визуализация с помощью программы VMD и показан механизм проникновения водорода в металлическую матрицу. Выяснено, что в нашей модели отдельный атом водорода достаточно легко проникает в решетку ванадия, а когда над поверхностью металла располагается молекула водорода, то сначала она совершает вращательные и колебательные движения и на расстоянии около 1 Å от поверхности ванадия диссоциирует на два атома (рис. 1).

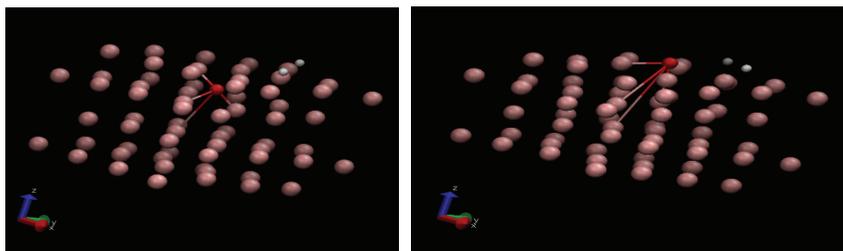


Рис. 1. Визуализация системы с примесью кислорода

Кислород обладает меньшим размером атома (60 пм) по сравнению с ванадием (134 пм) и отрицательно влияет на проницаемость во-

дорода, проникая из объема металла к поверхности по междоузлиям, и будет образовывать оксидную пленку. Размер атома серы (103,5 пм) и ванадия сопоставимы, как показывает молекулярно-динамический эксперимент, он не может занять какое-либо междоузлие и выталкивает атом ванадия из матрицы металла, двигаясь к поверхности, и занимает образовавшуюся вакансию (рис. 2).

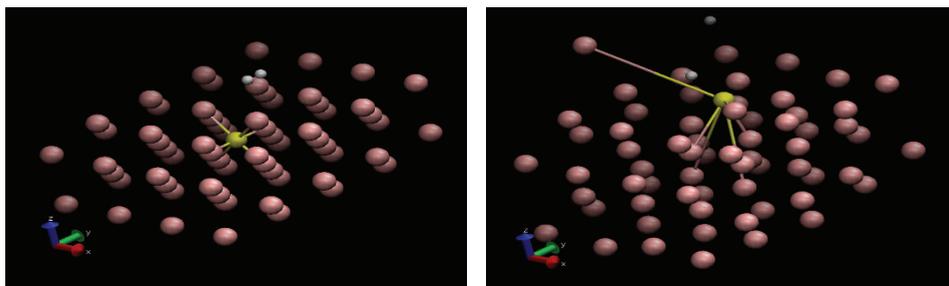


Рис. 2. Визуализация системы с примесью серы

В работе проведена оценка энергии растворения и коэффициентов диффузии водорода, проанализирована их температурная зависимость. Построены функции радиального распределения атомов при наличии и отсутствии водорода.

Можно сделать заключение о перспективности применения *ab initio* молекулярной динамики для изучения системы металл — водород.

*Работа выполнена в рамках госзадания ИМЕТ УрО РАН.*

*Авторы выражают благодарность академику РАН А. А. Ремпелю за поддержку работы и полезное обсуждение.*