ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

**МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«Перспективные материалы с иерархической структурой
для новых технологий и надежных конструкций»**

**X МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«Химия нефти и газа»**

Томск

Издательский Дом ТГУ

2018

DOI: 10.17223/9785946217408/136

**МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ОСАЖДЕНИЯ
ПАЛЛАДИЕВО-СЕРЕБРЯНЫХ НАНОПЛЕНОК**

Игошкин А.М.

Институт неорганической химии им. А.В. Николаева, 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 параметров водородопроницаемости и селективности.

В реальных условиях эксперимента эта задача чрезвычайно комплексной и многоуровневой. В частности, мембраны на основе палладия и его сплавов являются многослойными: 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. Поскольку водородопроницаемость и селективность являются свойствами, напрямую определяемыми материалом вещества и его внутренней структурой, то они могут быть предсказаны с помощью этого подхода. Поэтому существует возможность, исследуя посредством метода молекулярной динамики зависимость водородопроницаемости и селективности от технологических условий (температуры подложки, ее тип, энергии осаждающихся атомов), отыскивать направления для создания новых материалов для водородопроницаемых мембран.

На текущем этапе работы было проведено моделирование осаждения палладиево-серебряных пленок на различные подложки (палладиевую и серебряную). Исследована зависимость структуры получаемых слоев от их композиции, начальной энергии атомов и температур подложек.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №18-32-01059 мол_а.