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: 10.17223/9785946217408/150

ДЕФОРМАЦИОННЫЕ ОСОБЕННОСТИ НАНОКРИСТАЛЛОВ МАГНИЯ [0001]

С 5% ВОДОРОДА

^{1,2}Власова А.М., ³Смирнова Д.Е., ³Старииков С.В.

¹Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

²Уральский федеральный университет

имени Первого президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

³Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

Магний, благодаря способности связывать до 7,6% водорода (в расчете на единицу массы), высокой распространенности в природе и экономической выгоды, является одним из наиболее перспективных материалов для хранения водорода, и на настоящий момент нашел применение в ряде проектов. Однако недостаточно быстрая кинетика поглощения и высвобождения водорода, а также высокая температура выхода водорода (порядка 300° С) значительно ограничивают применение магния в водородной энергетике.

В данной работе проведено молекулярно-динамическое моделирование влияния 5 ат.% водорода на деформационные характеристики магния.

Разработка потенциала межатомного взаимодействия Mg-H (adp Mg-H) заключалась в подборе эталонных структур системы Mg-H, создании базы эталонных данных (состоящих из сил, энергий и напряжений, рассчитанных в рамках теории функционала плотности DFT), оптимизации потенциальных функций, и тестирования путем сопоставления расчетных данных с имеющимися экспериментальными данными.

Функциональная форма потенциала соответствует многочастичной модели angular-dependent potential, позволяющей учитывать не только центрально-симметричные силы межатомного взаимодействия, но и угловые. Применение такого подхода обусловлено наличием в системе Mg-H фаз со сложной симметрией.

Моделирование проводилось с использованием вычислительного пакета LAMMPS. Потенциал межатомного взаимодействия для сравнения взят из работы [1].

Моделируемая ячейка была выбрана в форме прямоугольного параллелепипеда размером 19.1 × 22.1 × 31.2 нм, ребрам которого соответствовали кристаллографические направления $\mathbf{X} = [\bar{1}100]$, $\mathbf{Y} = [11\bar{2}0]$, $\mathbf{Z} = [0001]$. Хаотично 5% атомов магния были заменены атомами водорода.

Одноосное сжатие осуществлялось путем переопределения скоростей атомов, находящихся в приповерхностных торцевых слоях толщиной 0,62 нм, что суммарно составило около 1,5%. Этим задавалось одноосное сжатие образца вдоль кристаллографической оси Z с постоянной скоростью 10 м/с.

Построены расчетные кривые «напряжение-деформация» для [0001]-нанокристалла с содержанием атомов водорода 5 ат.% с использованием потенциала межатомного взаимодействия, полученного нами (adp Mg-H), для сравнения приводятся кривые напряжение-деформация для [0001]-нанокристалла магния без содержания водорода (рис.1).

Введение водорода с одной стороны понижает максимальное напряжение σ_{MAX} , но повышает средние напряжения с 0,2 σ_{MAX} (без водорода) до 0,6 σ_{MAX} . Где σ_{MAX} - это максимальное напряжение, требуемое для зарождения дислокаций от свободной поверхности в кристаллите, не содержащем дислокаций. $\sigma_{MAX}^{Mg-H} = 1,6$ ГПа, $\sigma_{MAX}^{adp Mg} = 1,98$ ГПа, $\sigma_{MAX}^{eam Mg} = 3,55$ ГПа.

Рис. 1 Диаграмма напряжение-деформация для $[0001]$ -нанокристалла

Литература

1. D. Y. Sun, M. I. Mendelev, C. A. Becker, K. Kudin, Tomorr Haxhimali, M. Asta, J. J. Hoyt, A. Karma, and D. J. Srolovitz Crystal-melt interfacial free energies in hcp metals: A molecular dynamics study of Mg. Phys. Rev. B 73, 024116 (2006).

Расчеты проводились на суперкомпьютере «Уран» ИММ УрО РАН.

Автор благодарит Российский фонд фундаментальных исследований за финансовую поддержку (грант № 16-33-60027 мол_а_дк).