

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ДИФФУЗИИ ВОДОРОДА  
В ПАЛЛАДИИ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ**

Чан Тхи Ми Хуэ

Научный руководитель: ассистент, к.ф.-м.н. Н.В. Чистякова  
Национальный исследовательский Томский политехнический университет,  
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050  
E-mail: myhuesp2@gmail.com

**MOLECULAR DYNAMICS SYMULATION OF HYDROGEN DIFFUSION  
IN PALLADIUM**

Tran Thi My Hue

Scientific Supervisor: assistant of General Physics Department, Dr. N.V. Chistyakova  
Tomsk Polytechnic University, 634050, Russia, Tomsk, Lenin str., 30  
E-mail: myhuesp2@gmail.com

***Abstract.** In the present work, the diffusion of hydrogen atoms in the crystal lattice of palladium was investigated using the molecular dynamics. The diffusion coefficients, activation energies and preexponential factors were determined for structures with different hydrogen concentration. It is determined that the diffusion coefficients decrease and the activation energy of diffusion grows with increasing concentrations of hydrogen.*

**Введение.** Диффузионные процессы играют чрезвычайно важную роль как в природных, так и в технологических процессах. Моделирование – это способ подтверждения или опровержения теоретических предположений о механизмах протекания реакций. Компьютерное моделирование дает возможность учитывать и контролировать все параметры, влияющие на процесс диффузии. В настоящее время, большое число исследований, использующих компьютерное моделирование, проводится с помощью метода молекулярной динамики [1-6]. Преимущество этого метода в том, что молекулярно-динамическая модель учитывает структуру вещества на атомном уровне. В методе молекулярной динамики модель строится с использованием классической механики Ньютона и сама может определять какие процессы происходят в системе. Целью настоящей работы является моделирование зависимости диффузионных параметров от концентрации водорода в системе «палладий – водород» методом молекулярной динамики.

**Метод молекулярной динамики.** В методе молекулярной динамики (ММД) моделирование приводится на основе расчета эволюции системы взаимодействующих частиц путем интегрирования уравнений их движения, заданных с помощью второго закона Ньютона:

$$m_i \vec{a}_i = \sum_{j \neq i} \vec{F}_j$$

Взаимодействия между атомами описываются межатомным потенциалом  $U(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N)$ , который определяет зависимость потенциальной энергии системы из  $N$  атомов от их координат. В данной работе для расчета эволюции системы атомов, система уравнений движения (1) решается с помощью алгоритма Верле в программе LAMMPS [7].

**Потенциалы взаимодействия.** Задание потенциала межатомного взаимодействия для молекулярно-динамических расчетов достаточно сложная задача. В данной работе применяется потенциал, полученный методом погруженного атома (МПА) [8].

**Результаты.** В настоящей работе были построены структуры PdH<sub>x</sub> для разных концентраций водорода и для этих структур проведены расчеты диффузионных параметров. Концентрации внедренного водорода в системе водород-палладий могут меняться в широком диапазоне: от нуля до одного атома водорода на один атом металла. В таблице 1 представлены полученные значения параметров решетки и энергий системы водород-палладий при разных концентрациях. Видно, что с ростом концентрации водорода в интервале 0 < x < 1, параметр решетки и энергия решетки увеличиваются.

Таблица 1.

Параметр решетки и энергия системы на один атом при разных концентрациях водорода.

PdH <sub>x</sub>	a (Å)		E (эВ)	
	Настоящий расчет	В работе [4]	Настоящий расчет	В работе [4]
0	3.885	3.885	-3.910	-3.910
0.005	3.887	3.887	-3.902	-3.901
0.125	3.940	3.939	-3.719	-3.716
0.25	3.989	3.992	-3.560	-3.563
0.5	4.088	4.092	-3.337	-3.343
0.75	4.169	4.171	-3.188	-3.193
1	4.225	4.225	-3.081	-3.081

Из зависимости среднеквадратического смещения атомов от времени при разных концентрациях и температурах, были определены коэффициенты диффузии водорода в палладии по формуле:

$$D = \frac{\langle \bar{r}^2(t) \rangle}{6t}$$

Эти результаты представлены в виде графиков, показанных на рис.1. При повышении температуры коэффициенты диффузии растут. Коэффициенты диффузии с ростом концентрации уменьшаются. Это связано с уменьшением числа мест для прыжков атомов водорода.

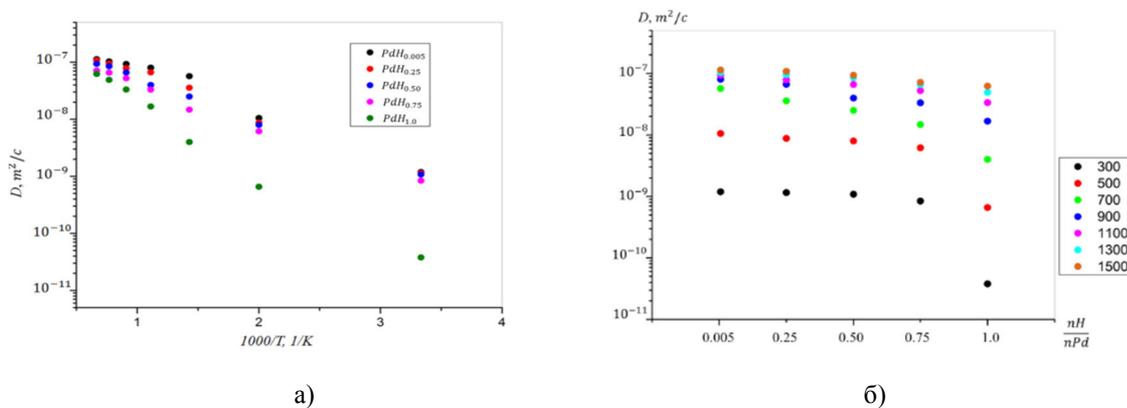


Рис.1. Зависимости коэффициента диффузии от температуры (а) и концентрации (б)

В таблице 2 представлены предэкспоненциальные множители и энергии активации для структур PdH<sub>x</sub> с разной концентрацией водорода.

Таблица 2.

*Диффузионные параметры для водорода в палладии.*

PdH <sub>x</sub>	D <sub>0</sub> (м <sup>2</sup> /с)	E <sub>a</sub> (эВ)
0.005	1.18 × 10 <sup>-6</sup>	0.195
0.25	9.10 × 10 <sup>-7</sup>	0.199
0.50	5.75 × 10 <sup>-7</sup>	0.205
0.75	4.86 × 10 <sup>-7</sup>	0.210
1.0	4.71 × 10 <sup>-7</sup>	0.256
*	2.9 × 10 <sup>-7</sup>	0.23

(\*) – результаты, полученные в эксперименте [9]

Видно, что с повышением концентрации водорода D<sub>0</sub> уменьшается, а энергия активации увеличивается. Величины диффузионных параметров, определенных в модели, находятся в соответствии с экспериментальными и теоретическими данными других авторов.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Мулюков Р.Р., Назаров А.А., Атомистическое моделирование материалов, наноструктур и процессов нанотехнологии - Учебное пособие для студентов-физиков. Уфа, РИО БашГУ, 2010.- С.156.
2. Чистякова Н.В. Моделирование структуры Pd и PdH методом молекулярной динамики // Перспективы развития фундаментальных наук: Труды XII Междунар. конференции студентов и молодых ученых. – Томск, 2015. –С. 308–310.
3. Chistyakova N. (2016) Molecular dynamics simulation of Pd and PdH structure. // Key Engineering materials. Vol 683, pp 583-588
4. Chistyakova, N. and Tran, T.M.H. (2016). A study of the applicability of different types of interatomic potentials to compute elastic properties of metals with molecular dynamics methods.// AIP Conf. Proc. Vol.1772, p.060019.
5. Larionov, V.V., Nikitenkov, N.N., Tyurin, Y.I. Hydrogen diffusion in steels under electron bombardment //Technical Physics. 2016 61 (5), pp. 793-797
6. Lider, A.M., Larionov, V.V., Syrtanov, M.S. Hydrogen concentration measurements at titanium layers by means of thermo-EMF // Key Engineering Materials . 2016. 683, pp. 199-202
7. Сайт программы LAMMPS [Электронный ресурс] Режим доступа: <http://lammps.sandia.gov>.
8. J.A. Zimmerman, X.W. Zhou, B.M. Wong and J.J. Hoyt (2008). An embedded-atom method interatomic potential for Pd-H alloys. Mater. Res Vol. 23, No. 3, pp 704-718
9. Максимов Е.Г., Панкратов О.А. Водород в металлах // Успехи физических наук. - 1999. - Т.116, №3. – С. 385-410.