ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ ВОДОРОДА НА АТОМНУЮ СТРУКТУРУ СПЛАВА ПАЛЛАДИЯ С СЕРЕБРОМ: РАСЧЕТЫ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

Л.Ю. Немирович-Данченко1,2), Е.Д. Северюхина1),

Л.А. Святкин1), И.П.Чернов1)

1)Национальный исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск, Россия

2)Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, г. Томск, Россия

Палладий и сплавы на его основе широко используются при изготовлении диффузионных мембран для очистки водорода. Особый интерес представляют сплавы палладия с серебром, в которых при насыщении водородом не возникают структурно-фазовые переходы, и, как следствие, мембраны из этих сплавов практически не подвержены водородному охрупчиванию. Для прогнозирования физических и механических свойств палладиево-серебряных мембран необходимо понимание влияния примеси серебра на характер взаимодействия палладия с водородом на атомарном уровне. В настоящей работе была изучена из первых принципов структурная стабильность систем Pd0,75Ag0,25Hx, Pd0,5Ag0,5Hx, Pd0,25Ag0,75Hx, а также PdHx и AgHx, где *x* принимает значения 0,25, 0,50 или 0,75.

Расчеты проводились в рамках теории функционала электронной плотности методом оптимизированного сохраняющего норму псевдопотенциала Вандербильта, реализованным в пакете программ ABINIT. Показано, что энергия связи серебра в сплавах Pd0,75Ag0,25, Pd0,50Ag0,50, Pd0,25Ag0,75 положительна, что свидетельствует о химической устойчивости исследуемых сплавов. Выявлено, что наибольшие энергии связи водорода наблюдаются в сплавах Pd0,75Ag0,25Hx и Pd0,50Ag0,50Hx при *x* равном 0,25 и 0,50. Установлено, что с ростом концентрации Н его энергия связи в сплаве PdAg преимущественно уменьшается. Необходимо также отметить, что в сплаве Pd0,25Ag0,75 водород при коцентрациях *x* > 0,25 не растворяется.