
科学家建立金属中纳米孔洞俘获氢的定量预测模型

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/6034.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

科学家建立金属中纳米孔洞俘获氢的定量预测模型。中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所刘长松课题组吴学邦与麦吉尔大学宋俊合作，在金属中的氢行为研究中取得新进展，首次建立了体心立方金属中纳米孔洞氢俘获和聚集起泡的定量预测模型。该研究为理解氢致损伤，以及设计新型抗氢致损伤材料提供了可靠的理论基础和工具。相关成果发表在《自然-材料》(Nature Materials)上。

氢是宇宙中最丰富的元素，也是腐蚀的典型产物，因此几乎总是存在于各种各样的服役环境中。同时，氢又是元素周期表上最小的元素，极易钻进金属材料的内部，导致材料损伤。例如，在磁约束核聚变反应堆的核心部位，燃料氢同位素极易渗透进保护其他部件的钨金属装甲，与中子辐照产生的纳米孔洞结合，从而形成氢气泡并产生裂纹，最终对材料的结构和服役性能造成致命损伤，危及聚变装置的安全。

显然，理解氢与纳米孔洞的相互作用是解决以上问题的关键。然而，人们对氢在纳米孔洞中的一些基本性质，例如氢在孔洞内结构分布特征、能量学等基本问题，却依然未能给出答案，致使无法回答诸如氢在纳米孔洞中如何分布、孔洞对氢的吸引有多强、能容纳多少氢、又会带来多大的氢气压等问题。这其中主要存在着几个难题：1) 实验上难以分辨半径较小的氢原子，而计算模拟的空间和时间尺度有限，难以处理复杂结构，也难以直接对比实验；2) 纳米孔洞的内壁并不光滑，其原子排布十分复杂，为氢在内壁上吸附的研究带来挑战；3) 多个氢之间会互相影响，进一步增加了问题复杂度。

为攻克上述难题，研究人员采用基于密度泛函理论的模拟方法，在原子尺度上获得了精确的氢与纳米孔洞相互作用数据，并结合多尺度模拟方法，进行宏观尺度模拟，从而与实验结果进行对比验证。针对氢在不光滑纳米孔洞内壁上吸附问题，他们以体心立方金属钨为例，通过分析氢的运动轨迹，发现氢总是以单原子形式有次序地吸附在一些特定位置上。根据近邻金属原子的缺失情况，应用魏格纳-赛兹(Wigner-Seitz)元胞将这些位置归纳为五类吸附点，而这五类吸附点正好对应氢的五个依次吸附能级。于是，氢在复杂的孔洞内壁吸附规律可概括为五类吸附位点及相应的五个吸附能级，从而准确描述氢在不光滑纳米孔洞内壁上的吸附特性。

为考察内壁上多个氢之间的相互影响，研究人员分析了上万种不同情况下的氢-氢相互作用，发现吸附的氢原子之间相互排斥，其排斥能正比于原子间距离的-5次方(即氢的面密度的2.5次方)。随着吸附氢原子数量的增加，内壁上氢原子之间分布越来越紧密，斥力越来越大，导致部分氢逐渐被挤出内壁，从而在孔洞芯部以氢气分子形式析出。研究同时发现，这些氢气分子的性质可用高压氢的状态方程描述，即其能量正比于孔洞芯部氢的体密度的平方。

基于上述规律，研究人员建立了一个普适的定量模型：内壁上氢的能量取决于吸附点的类型以及内壁上氢的面密度，而芯部氢的能量则由氢的体密度决定。由该模型预测得到的结构和氢俘获能，与模拟计算结果高度一致。基于该模型的预测，他们进一步开展了钨中氢脱附速率的多尺度模拟，通过与氢的脱附实验结果对比验证了模型的正确性。

该研究工作得到国家磁约束核聚变能发展研究专项、国家自然科学基金、国家留学基金委、中科院青促会等的支持。

论文链接

纳米孔洞内壁上氢的五类吸附点的划分(左)及对应的五个能级(右)。红球为缺失的金属原子，黑框为其魏格纳-赛兹元胞，黄色和绿色区域为氢运动的轨迹云。

氢在纳米孔洞内的分布示意图，白色和蓝色球分别代表氢和金属原子。其中为内壁特定位置氢的吸附能级，为内壁上氢的面密度，为芯部氢的体密度。

不同尺寸纳米孔洞对氢的俘获能，数据点为基于密度泛函理论的计算结果，实线为模型预测值。

钨中氢的脱附速率随温度变化，数据点为实验结果，实线为基于预测模型的多尺度模拟值。

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发