

Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации
Федеральное государственное
бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тверской государственный университет»

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ
ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ,
НАНОСТРУКТУР
И НАНОМАТЕРИАЛОВ**

**PHYSICAL AND CHEMICAL ASPECTS
OF THE STUDY OF CLUSTERS,
NANOSTRUCTURES AND
NANOMATERIALS**

**FIZIKO-HIMIČESKIE ASPEKTY
IZUČENIÂ KLASTEROV,
NANOSTRUKTUR I NANOMATERIALOV**

выпуск 12

ТВЕРЬ 2020

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Ф50

Рецензирование статей осуществляется на основании Положения о рецензировании статей и материалов для опубликования в журнале «Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов».

Официальный сайт издания в сети Интернет:

<https://www.physchemaspects.ru>

Ф50 Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2020. – Вып. 12. – 908 с.

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации СМИ ПИ № ФС77-47789 от 13.12.2011.

Издание составлено из оригинальных статей, кратких сообщений и обзоров теоретического и экспериментального характера, отражающих результаты исследований в области изучения физико-химических процессов с участием кластеров, наноструктур и наноматериалов физики, включая межфазные явления и нанотермодинамику. Журнал предназначен для научных и инженерно-технических работников, преподавателей ВУЗов, студентов и аспирантов. Издание подготовлено на кафедре общей физики Тверского государственного университета.

Переводное название: Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials

Транслитерация названия: Fiziko-himičeskie aspekty izučeniâ klasterov, nanostruktur i nanomaterialov

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Print ISSN 2226-4442

Online ISSN 2658-4360

© Коллектив авторов, 2020

© Тверской государственный университет, 2020

УДК 669:541.1

Оригинальная статья

ВОДОРОДОПРОНИЦАЕМОСТЬ АМОРФНЫХ, НАНО- И КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА И НИКЕЛЯ

В.А. Полухин, Н.И. Сидоров, Р.М. Белякова

ФГБУН «Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук»

620016, Россия, Екатеринбург, ул. Амундсена, 101

p.valery47@yandex.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.457

Аннотация: Исследована кинетика проницаемости и диффузии водорода в гидрированных мембранных сплавах на основе *Fe* и *Ni*, обладающих функциональными характеристиками, конструкционной прочностью и термостабильностью, и являющихся многообещающей альтернативой дорогим палладиевым сплавам. Изучены прочностные характеристики, термостабильность и устойчивость к водородному охрупчиванию. Рассмотрены механизмы структурирования, диффузии и проницаемости водорода в кристаллическом, аморфном, нанокристаллическом состояниях. Для мембранных сплавов особо важным аспектом является сочетание в открытых структур (аморфных и ОЦК), в то время как для аккумуляции водорода, помимо каналов транспорта (диффузии и проницаемости) также необходимы и высокоплотные интерметаллидные кластеры. Отмечено, что при длительной эксплуатации вследствие возникновения плотных кластерных конфигураций среднего упорядочения, сокращающих диффузионные каналы, начинается снижение через них транспорта водорода.

Ключевые слова: мембранные сплавы, аморфная структура, межатомные связи, кластеры, гидрирование, стеклование, сорбция, диффузия, проницаемость, интерметаллиды, гидриды, водородная энергетика, молекулярная динамика.

1. Введение

Водородная энергетика – бурно развивающаяся отрасль энергетики, основанная на использовании водорода в качестве средства для аккумуляции, транспортировки и потребления энергии. При использовании водорода, как энергоносителя, решается и планетарная проблема парникового эффекта, и региональные экологические проблемы. Получение сверхчистого водорода особенно важно с его использованием в высокотехнологичных областях – синергетики, создание спин-поляризованных материалов и высокоэффективных водородных электрогенераторов [1]. В настоящее время используются разнообразные методы получения, очистки водорода и его хранения. Большую часть водорода получают методом парогазового реформинга природных газов, содержащих примеси *CO*, *CO*₂, *CH*₄, включая и *H*₂*O* (газ) [2]. Мембранное разделение в настоящее время признано во всем мире как один из наиболее перспективных методов [3-5]. Наиболее эффективными являются мембранные сплавы на основе палладия (*Pd* – *Ag*, легированные *Y*, *Au*, *Sc*, *In*, *Ru* и др.), разработанные еще в 60-е годы [5-9]. Однако развитие

«зеленой» водородной энергетики требует разработки и более дешевых мембранных сплавов [11-13]. Интерес исследователей привлекли сплавы на основе металлов V группы и переходных металлов (*Fe*, *Ni*, *Ti* и др.) в кристаллическом, нанокристаллическом и аморфном состояниях [3-7, 14-16]. Именно мембраны из аморфных сплавов, образованные комбинацией *Ni* с другими переходными металлами, уже успешно внедряются, благодаря их высокой производительности. Они формируются непосредственно из расплавленного состояния быстрой закалкой, которая осуществляется либо разливом расплава на поверхность быстро вращающегося барабана из меди или стали, либо литьем расплава в кокиль и разливкой [17-19].

Для повышения термостабильности, понижения температуры гидридообразования, предотвращения возникающих дефектов, нарушающих структурную целостность мембран необходимо введение в эти сплавы таких металлов, как *Mo*, *W*, *Hf* [8-10]. Повышение термостабильности и предотвращения кристаллизации [20-22], может быть также диверсифицировано последующим отжигом [4, 11, 20]. Доля соавторов [11] были успешно разработаны аморфные трёхкомпонентные мембраны состава $Ni_{60}Nb_{40-X}Zr_X$ ($10 < X < 20$) с хорошей проницаемостью и стабильностью при 673 К. Интенсивно разрабатываются нанокристаллические водородоселективные мембраны на основе менее плотных ОЦК сплавов (*Co*, *V*, *Cr*, *Ta*, *Nb*), которые, тем не менее, подвержены охрупчиванию из-за чрезмерного поглощения водорода [23-25].

Целью представленной работы является комплексный анализ водородопроницаемости мембран из аморфных и частично кристаллизованных легированных сплавов *Fe–Ni* в интервалах температур от 500 К до 775 К с давлениями на входе от 0,1 МПа до 0,15 МПа.

2. Кинетика водорода в аморфных и нанокристаллических многокомпонентных сплавах на основе железа и никеля

Нами проведены молекулярно-динамические расчеты [12, 13, 16, 26], экспериментальные исследования [4, 6, 7, 12, 27- 29], анализ литературных данных [8-11, 30-31], которые позволили продвинуться в понимании структуры мембранных сплавов и на основе *Fe–Ni* (расположение атомов в координационных полиэдрах и межатомные расстояния между атомами), кинетики водорода – диффузии и проницаемости. Ранее нами были созданы молекулярно-динамические модели чистых расплавов и аморфных железа и никеля, а также их сплавов [12, 16, 17] на основе межатомных потенциалов, рассчитанных квантово-механическими методами [32-34]. В рамках этих моделей были определены не только

структурные, но и кинетические характеристики – коэффициенты диффузии, оцененные по среднеквадратичным траекториям мигрирующих атомов и представленными таблицами, и функциональными температурными зависимостями Аррениуса – для моделируемых состояний $D_{ат} = (D_0 = 0,5) \times 10^{-5} \exp((-40,5 \pm 1,5) / RT)$ м²/с в интервале температур от $1/3 T_m$ T_m до 300 К (T_m – температуры плавления *Fe*). При проведении экспериментальных исследований электролитического гидрирования аморфных лент на основе легированных систем *Fe–Ni* были дополнительно оценены и коэффициенты диффузии экранированных электронной плотностью протонов в воссозданных МД-моделированием аморфных состояниях (в интервалах от 300 К до 550 К) [17, 28, 35-36]. Коэффициенты диффузии водорода в аморфных металлах и сплавах мало отличались, также воспроизведенных функциональной температурной зависимостью Аррениуса $D_H = D_0 \times 10^{-8} \exp((-30,5 \pm 3,5) / RT)$ м²/с, что не очень отличается от экспериментальных значений электролитического гидрирования $\{D_m = 4,2 \times 10^{-8} \exp((-35,5 \pm 2,9) / RT)$ м²/с [6].

Испытания электрохимической проницаемости водорода были выполнены авторами [9] для аморфного сплава *Fe₄₀Ni₃₈Mo₄B₁₈* при температурах в диапазоне от 313 К до 353 К. В этом эксперименте применен повышенный электрохимический потенциала катодной зарядки $U = -2,0$ В/SCE (Standard Calomel Electrode – стандартный каломельный электрод) с электролитом *NaOH* (0,1*N*). При этом кривые проницаемости имели двойную сигмоидальную форму, что указывает на образование гидридов, поскольку концентрация водорода в сплаве была увеличена в 100 раз в сравнении с растворимостью водорода в исходной аморфной матрице. Эффективность процессов газового разделения контролируется такими параметрами, как степень растворимости водорода, его диффузии и проницаемости. МД-моделированием, а также рентгеновской дифракцией конфигурационного расположения атомов металлов определяются диффузионные каналы и траекторий движения через междоузлия атомов водорода, степень вероятности их зависания и оседлости (образования подвижных и захваченных водородом позиций – ловушек), включая формирования гидридов.

В проводимых нами [7, 16, 26] и другими авторами [5, 29-31] экспериментах газового разделения эти параметры учитывались – как с определением растворимости для соответствующих температурных интервалов (от 473 К до 1073 К), т.е. от аморфных состояний до nano- и кристаллических в рамках относительно невысоких давлений на входной мембранной поверхности до 0,1 МПа [4]. Фиксировались и кинетические характеристики – проницаемость Φ и диффузия D_H) не только в чистых

металлах Fe и Ni , но и в сплавах $Fe-Ni$. Наши результаты фактически повторили результаты, приведенные в работе Робертсона [23]. Отметим, что при существенном повышении температуры для $Fe-Ni$ сплавов с содержанием Ni менее 30 ат. % происходит известная фазовая трансформация мартенситного типа ГЦК \rightarrow ОЦК, вызванная разным ходом аррениусовских кривых с небольшим изменением энергий для фаз (большей для ГЦК фазы!), что ведет не к симбатным температурным зависимостям, как диффузии, так и проницаемости для разных фаз [31, 36-41].

Для достижения аморфизации допустимо добавлять в составы не только металлы, но и металлоиды – бор, фосфор и кремний (сплав FINEMET), которые незначительно влияют на температуру кристаллизации и термическую стабильность аморфных мембран. В аморфные сплавы на основе железа обычно вводятся также атомы Si и Nb . Атомы Si формируют первичные центрированные кластеры, как активные каталитические центры, для последующего формирования кристаллитов нанофазы с ОЦК-структурой, а атомы Nb исполняют роль ингибитора, тормозя рост кристаллитов (принцип двухстадийной нанокристаллизации) [35]. Присутствующий в сплаве FINEMET в качестве лиганда Nb , препятствует укрупнению нанокристаллов ОЦК- Fe и стабилизирует матричную наноструктуру. Однако механизмы аморфизации, наноструктурирования со стабилизацией нанофаз в сплавах с высоким содержанием железа отличаются от механизма для сплавов FINEMET, как раз из-за отсутствия ингибирующих атомов Nb .

Нами проведен анализ наиболее интересных аморфных сплавов на основе железа различных составов [11, 29-31, 36], применяемых в качестве прекурсоров для получения нанокристаллических сплавов. Так аморфные и нанокристаллические ленты составов $Fe_{77,3}Ni_{1,1}B_{13,6}C_{0,2}P_{0,009}$ [4] и $Fe_{40}Ni_{48}Mo_4B_{48}$ [10, 29-31] были получены методом быстрой закалки из соответствующих расплавов. Ленты имели следующие размеры: ширина 25,4 мм, толщина 25 мкм. При последующей изотермической обработке при 698 К в течение 30 минут в инертной атмосфере структура изначально аморфных сплавов претерпела трансформацию с формированием нанокристаллической фазы с зернистостью менее 200 нм. Температура кристаллизации была выбрана из тестов дифференциальной сканирующей калориметрии, DSC [29-30]. Рентгенографическое исследование структуры сплавов до и после их гидрирования проводилось с применением дифрактометра ДРОН ($Si-K\alpha$ излучение).

Исходя из анализа кинетической зависимости водородной проницаемости (см. рис. 1 а) можно сделать вывод, что все кривые имеют сигмоидальную форму без признаков гидридообразования. При

гидрировании аморфного сплава $Pd_{80}Si_{20}$ даже выявлено образование гидридов, о чем свидетельствует появление на дебаеграмме соответствующих колец, свидетельствующих о возникновении дальнего упорядочения [28].

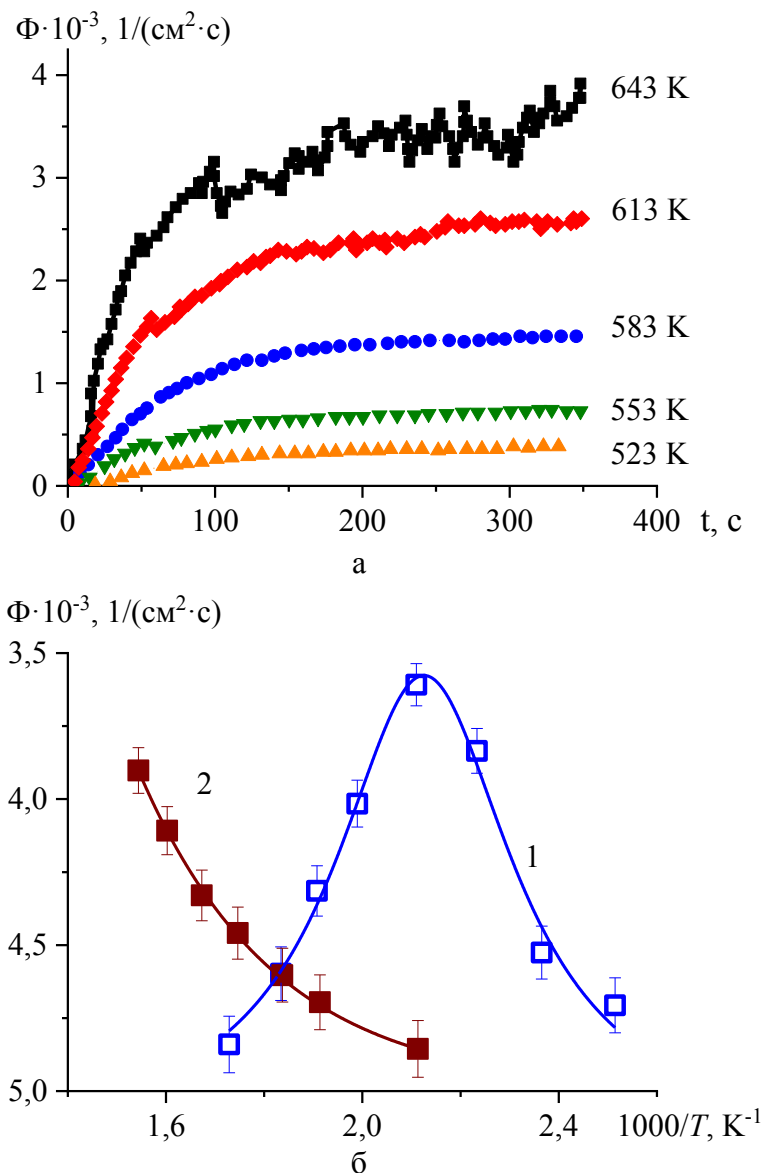


Рис. 1. а – кинетическая зависимость водородной проницаемости Φ – нанокристаллического сплава $Fe_{40}Ni_{38}B_{18}Mo_4$ ($P=133,3$ Па) при различных температурах [10]; б – температурная зависимость Φ сплава с заводской номенклатурой 2HCP ($Fe_{77,3}Ni_{1,1}B_{13,6}C_{0,2}P_{0,009}$) ($P=1$ МПа) в аморфном состоянии (кривая 1) и в наносостоянии (кривая 2) [4].

Специфика диффузии D_H водорода в работе [10] оценивалась при разных температурах в интервале 523–643 К – как для аморфного сплава $Fe_{40}Ni_{38}B_{18}Mo_4$ (см. рис. 1 а) так и нанокристаллического (см. рис. 1 б) [4]. На

дифрактограммах обоих сплавов после выделения водорода не были зафиксированы гидриды (при температуре ~ 570 К и давлении ~ 1 МПа). Графики же водородопроницаемости свидетельствовали об устойчивом и эффективном процессе выделения водорода. Для аморфного сплава водородопроницаемость достигла $\Phi \sim 4,0 \times 10^{-5}$ 1/(см²·с), что в 1,6 ниже $\Phi \sim 2,5 \times 10^{-5}$ 1/(см²·с), чем для нанокристаллического.

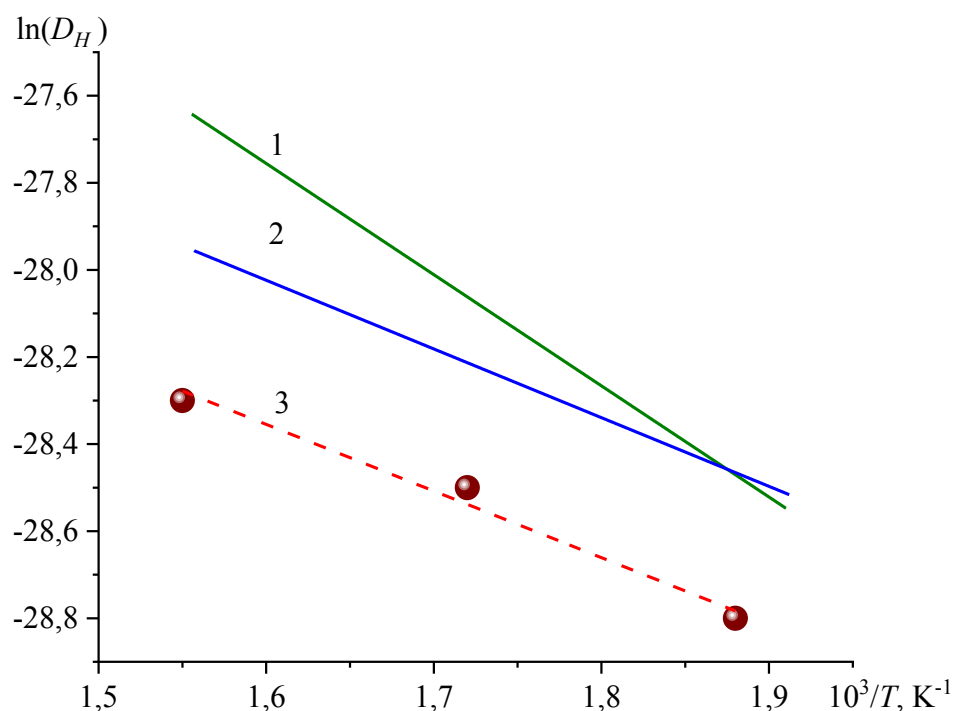


Рис. 2. Логарифмическая зависимость диффузии водорода от обратной температуры для сплава $Fe_{40}Ni_{38}B_{18}Mo_4$ в аморфном (кривая 1) и в нанокристаллическом состоянии (кривая 2) в условиях: давление $P = 1$ МПа и температурах от 523 К до 643 К) [10]. 3 – теоретический расчет МД-моделирования аморфного железа.

На рис. 2 показана зависимость диффузии водорода D_H от температуры, полученная МД-моделированием для аморфных и частично кристаллизованных сплавов, которая сравнивается с опытными данными работы [9, 10]. При этом коэффициенты диффузии водорода в аморфном и аморфно-кристаллическом образцах представлены, как функция температуры, выражениями: $D_H = 5,1 \pm 0,5 \times 10^{-12} \exp(-11,0 \pm 3,5 / RT)$ м²/с и $D_H = 3,6 \pm 0,5 \times 10^{-11} \exp(-19,8 \pm 3,3 / RT)$ м²/с соответственно. Видно, что диффузия водорода в образце после частичной кристаллизации несколько выше, чем в аморфной структуре. Это происходит благодаря механизмам аннигиляции дефектов в сочетании с появлением упорядоченных кристаллов, внедренных в аморфную структуру, что может увеличить скорость диффузии.

Для негидрированного и гидрированного аморфного сплава $Fe_{40}Ni_{38}Mo_4B_{18}$ представлены дифрактограммы (см. рис. 3). На дифрактограммах видно отсутствие гидридов. Однако после операции гидрирования форма второго аморфного максимума (см. рис. 3) существенно изменилась. Произошла инверсия наблюдаемого правого плеча этого максимума на левую сторону, как результат перераспределения межатомных расстояний в кластерных конфигурациях и междоузлиях, составляющих диффузионные каналы транспорта водорода.

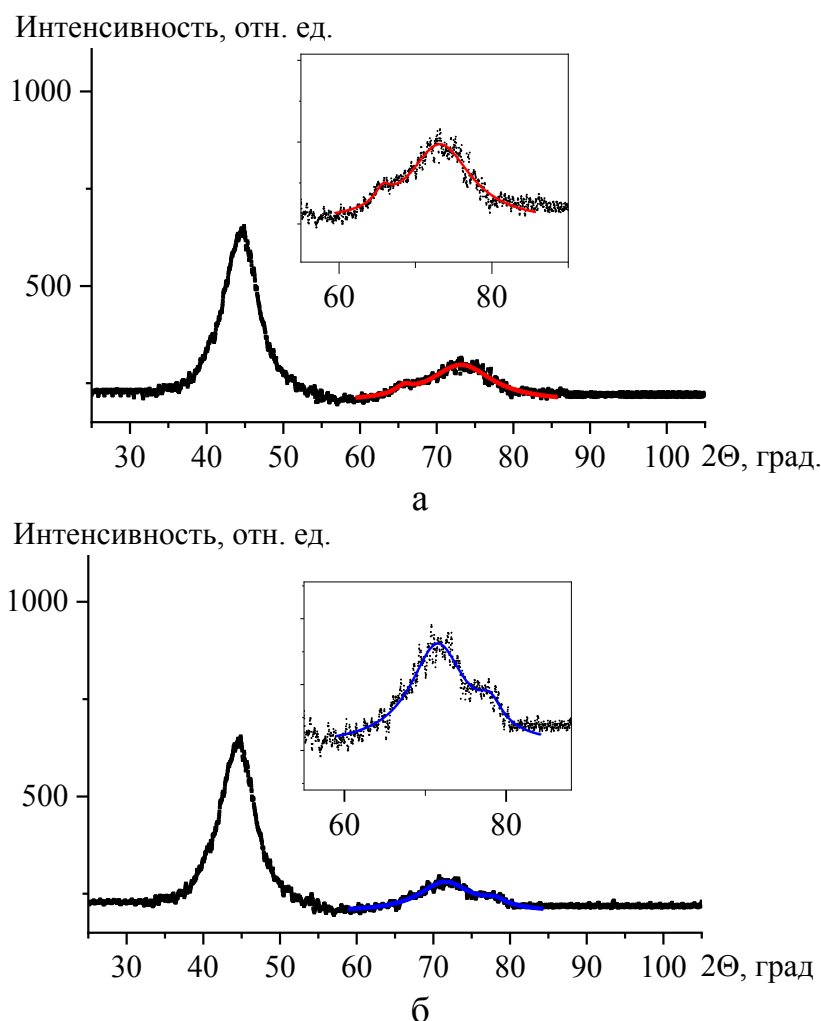


Рис. 3. Дифрактограммы лент гидрированного (а) и негидрированного (б) аморфного сплава состава $Fe_{40}Ni_{38}B_{18}Mo_4$ [16, 32]. На вставках показан укрупненный фрагмент дифрактограмм с выраженным плечом справа (а) и слева (б) от второго аморфного максимума.

Этот эффект подтверждается молекулярно-динамическим моделированием парциальных функций радиального распределения (ПФРР), представленными на рис. 4, для железа в сплаве FINEMET 1

($Fe_{73.5}Cu_1Nb_3Si_{13.5}B_9$) до (кривая 1) и после его наводороживания (кривая 2), полученные в [28]. На рис. 4 также схематично представлено образование ответственных за изменение формы второго пика ФРР, типичных дефектов при прохождении через треугольный потенциальный барьер (его «седловую» точку) атома водорода (протона, эффективно экранированного зарядовой электронной плотностью) [28, 32].

Что касается гидридообразования в аморфных сплавах, то появление гидридов зависит от наличия гибридизованных связей. В некоторых случаях гидриды присутствуют и в нанокристаллических сплавах, если в их составе содержатся металлоиды (например, в аморфном – $Pd_{80}Si_{20}$ [16, 28]).

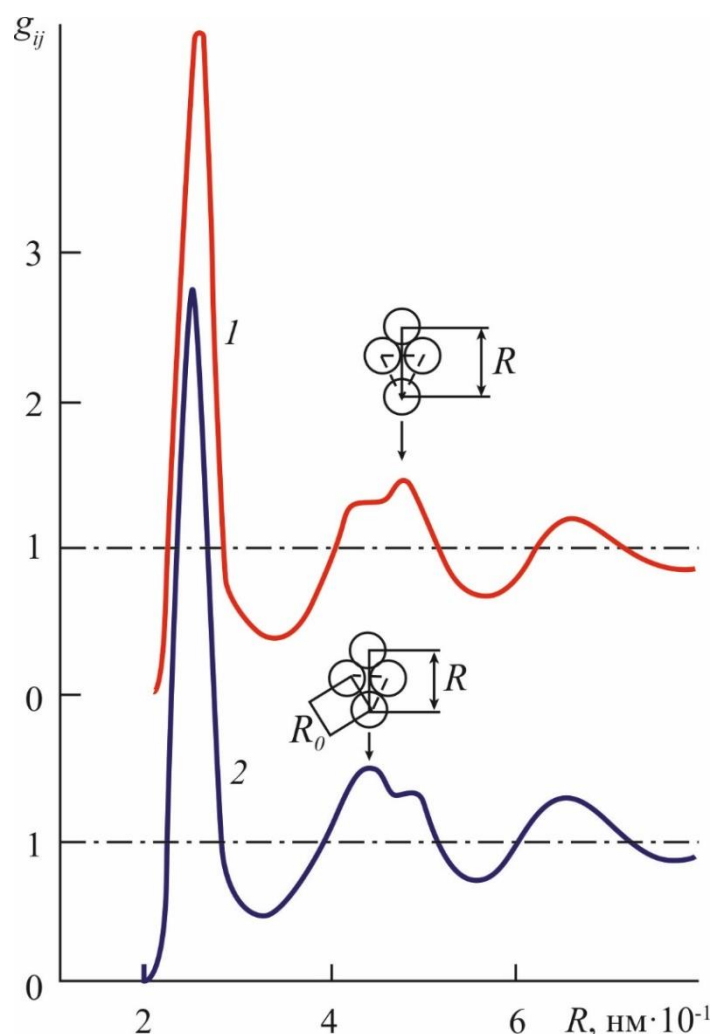


Рис. 4. ПФРР железа для аморфного сплава FINOMET 1 ($Fe_{73.5}Cu_1Nb_3Si_{13.5}B_9$) после гидрирования (кривая 1) и до гидрирования (кривая 2) [28, 32].

Однако, в нано- и кристаллических аналогах могут присутствовать гидриды [25, 31], что следует также из результатов электрохимические испытаний [30]. Для сплавов на основе $Fe-Ni$ значения проницаемости,

согласно [9, 10, 25], составляют 10^{-9} мол $\text{м}^{-1}\text{с}^{-1}$ $\text{Па}^{-0,5}$ при 643 К. Эта величина сравнима с проницаемостью легированных мембранных сплавов на основе $\text{Ni}-\text{Nb}$, например, $\text{Ni}_{0,6}\text{Nb}_{0,4}\text{Zr}_{0,10}$ и др. [27, 36-38]. Однако, как следует из практики, водородная проницаемость аморфных мембран на основе легированных сплавов $\text{Fe}-\text{Ni}-(\text{Si}, \text{B} \text{ или } \text{P})$ все же уступает проницаемости аморфных и нанокристаллических сплавов, легированных преимущественно металлами V группы именно из-за наличия металлоидов на рабочих поверхностях мембран, поскольку металлоиды затрудняют течение процессов адсорбции/десорбции водорода. Однако с помощью полировки и двухстороннего покрытия рабочих поверхностей защитных пленок металлов Pd , Ni и Al можно добиться положительного эффекта, как при симметричном, так и при ассиметричном нанесении.

3. Обсуждение и анализ результатов исследований

Анализ исследованных сплавов с составами на основе железа ($2\text{HCP} - \text{Fe}_{77,3}\text{Ni}_{1,1}\text{B}_{13,6}\text{C}_{0,2}\text{P}_{0,009}$ [4] и $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{38}\text{B}_{18}\text{Mo}_4$ [9, 10, 29-31]) показывает, что качественно они мало отличаются от таких сплавов, как FINEMET (лента шириной – 25,4 мм и толщиной $d=25$ мкм). Выявлено, что аморфные сплавы и полученные термообработкой их нанокристаллические аналоги вполне приемлемы для разделения газов и получения сверхчистого водорода [6-8, 25-28]. Однако в аморфных сплавах, в зависимости от состава, могут образовываться гидриды [29], на что указывает двойная сигмоидальная форма кривой проницаемости водорода [9]. А методом рентгеновской дифракции (XRD) выполненной для рассматриваемых гидрированных аморфных сплавов на основе $\text{Fe}-\text{Ni}$ были также обнаружены изменения межатомных расстояний после сорбции водорода (инверсия плеча второго аморфного максимума, см. рис. 3). Однако после операции гидрирования и дегазации водорода форма второго пика с правым плечом восстанавливалась [32, 35].

Наши исследования [4,7, 16, 28], как и исследования других авторов [39-41], свидетельствуют о том, что в аморфных и нанокристаллических сплавах на основе $\text{Fe}-\text{Ni}$ коэффициент растворимости водорода выше, чем в кристаллических аналогах, и даже выше чем в сплавах на основе Pd . Наиболее перспективным считается мембранный сплав $\text{Fe}-\text{Nb}$, созданный в токийском институте металлов [42] с вариацией концентрации Nb (и незначительных стабилизирующих структуру матрицы добавок Pd) и оптимизацией режима насыщаемости водорода (давление, температура) с непременным покрытием рабочих поверхностей мембран: на входе – $\text{Pd}-\text{Ag}$, на выходе – Ni или Al . Это действительно позволило разработчикам найти такие характеристики, которые обеспечивали бы

интенсивный поток выделяемого водорода, а также термическую и механическую стабильность без охрупчивания и без образований дендритных и гидридных кластеров.

4. Заключение

Проведен анализ результатов исследования кинетических характеристик – диффузии и проницаемости водорода в аморфных и частично кристаллизованных легированных сплавах на основе $Fe-Ni$ в интервале от 500 К до 773 К. Показано, что аннигиляция структурных дефектов и кристаллизация, вызванная частичным упорядочением при термообработке, активизируют процессы сорбции, диффузии, проницаемости водорода и вероятных накоплений водорода в ловушках. Установлено, что изучаемые сплавы обладают высокими рабочими характеристиками: механическая устойчивость, отсутствие гидридного охрупчивания, хорошая растворимость, активная диффузия и проницаемость водорода.

Для понимания процессов, происходящих при изменении фазово-структурных состояний в аморфных и нанокристаллических мембранных сплавах на основе $Ni-Fe$, легированных металлами 5 группы, целесообразны дальнейшие исследования диффузии водорода и его изотопов, водородной хрупкости, термической стойкости.

Высокая эффективность указанных сплавов в сочетании с их дешевизной делают их перспективными для мембранных технологий в водородной энергетике.

Работа выполнена по Государственному заданию ИМЕТ УрО РАН в рамках Программы фундаментальных исследований государственных академий (тема 19-2), регистрационный номер проекта № 0396-2019-0002.

Библиографический список:

1. **Бурханов, Г.С.** Сплавы палладия для водородной энергетики / Г.С. Бурханов, Н.Б. Горина, Н.Б. Кольчугина, Н.Р. Рошан // Российский химический журнал (Журнал Российского химического общества им. Д.И. Менделеева). – 2006. – Т. L. – № 4. – С. 36-40.
2. **Fontana, A.D.** Hydrogen permeation and surface properties of $PdAu$ and $PdAgAu$ membranes in the presence of CO , CO_2 and H_2S / A.D. Fontana, N. Sirini, L.M. Cornaglia, A.M. Tarditi // Journal of Membrane Science. – 2018. – V. 563. – P. 351-359. DOI: 10.1016/j.memsci.2018.06.001.
3. **Гольцов, В.А.** Перспективы водородной мембранной технологии: технические и рыночные аспекты / В.А. Гольцов, М.В. Гольцова, Г.И. Жиров, Л.Ф. Гольцова и др. / Берлин – ПМ'2010. Четвертая международная конференция «Платиновые металлы в современной промышленности, водородной энергетике и в сферах жизнеобеспечения

- будущего», Берлин, Германия, 30 мая - 4 июня 2010: материалы конференции. – М.: Асми, 2010. – С. 80-86.
4. **Evard, E.A.** Hydrogen permeability of amorphous and recrystallized iron alloys / E.A. Evard, N.I. Sidorov, I.E. Gabis // Technical Physics. – 2000. – V. 45. – I. 3. – P. 377-379. DOI: 10.1134/1.1259639.
5. **Dolan, M.D.** Tubular vanadium membranes for hydrogen purification / M.D. Dolan, D.M. Viano, M.J. Langley, K.E. Lamb // Journal of Membrane Science. – 2018. – V. 549. – P. 306-311. DOI: 10.1016/j.memsci.2017.12.031.
6. **Белякова, Р.М.** Влияние гидридов $Ti-H$ на межатомные взаимодействия и характеристики, легированных Ti мембранных сплавов на основе $V-Ni$ / Р.М. Белякова, В.А. Пивень, Н.И. Сидоров, В.А. Полухин // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2019. – Вып. 11. – С. 74-85. DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.074.
7. **Kozhakhmetov, S.** Alloys based on group 5 metals for hydrogen purification membranes / S. Kozhakhmetov, N. Sidorov, V. Piven, I. Sipatov I., I. Gabis, B. Arinov // Journal of Alloys and Compounds. – 2015. – V. 645. – Supplement 1. – P. S36-S40. DOI: 10.1016/j.jallcom.2015.01.242.
8. **Palumbo, O.** New studies of the physical properties of metallic amorphous membranes for hydrogen purification / O. Palumbo, F. Trequattrini, S. Suchismita, et al. // Challenges. Special Issue: Selected papers from Thematic Meeting «Materials for Energy». – 2017. – V. 8. – I. 1. – Art. № 4. – 12 p. DOI: doi.org/10.3390/challe8010004.
9. **Fagundes, L.G.S.** Hydrogen diffusivity and solubility in a Fe -based amorphous metallic alloys / L.G.S. Fagundes, L.F.L. Torres, D.S. dos Santos // Journal of Alloys and Compounds. – 2009. – V. 483. – I. 1-2. – P. 540-543. DOI: 10.1016/j.jallcom.2008.08.100.
10. **Ribeiro, M.** Hydrogen gas permeation through amorphous and partially crystallized $Fe_{40}Ni_{38}Mo_4B_{18}$ / M. Ribeiro, L. F. Lemus, D. S. Dos Santos // Materials Research. – 2012. – V. 15. – № 5. – P. 818-820. DOI: 10.1590/S1516-14392012005000104.
11. **Dolan, M.D.** Hydrogen transport properties of several vanadium-based binary alloys / M.D. Dolan, M.E. Kellam, K.G. McLennan, D. Liang, G. Song // International Journal of Hydrogen Energy. – 2013. – V. 38. – I. 23. – P. 9794-9799. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2013.05.073.
12. **Polukhin, V.A.** Structure of alloys $Pd_{1-x}Si_x, Fe_{1-x}P_x$ in liquid and amorphous states / V.A. Polukhin, E.A. Pastukhov, N.I. Sidorov // Physics of Metals and Metallography. – 1984. – V. 57. – I. 3. – P. 176-179.
13. **Belyakova, R.M.** Spatial arrangement of the fragmented phases in nanostructured 3d metal alloys during a change in the melt composition and cooling conditions / R.M. Belyakova, V.A. Polukhin, L.K. Rigmant // Russian Metallurgy (Metally). – 2010. – V. 2010. – I. 8. – P. 681-698. DOI: 10.1134/S0036029510080045.
14. **Ковнеристый, Ю.К.** Объемно-аморфизующиеся металлические сплавы / Ю.К. Ковнеристый. – М.: Наука, 1999. – 80 с.
15. **Fukai, Y.** The metal-hydrogen system: basic bulk properties / Y. Fukai. – 2nd ed. In: Springer Series in Materials Science. – Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2004. – XII, 500 p.
16. **Belyakova, R.M.** Formation of the structure and the properties of multicomponent iron-based alloys as a function of hydrogenated melt solidification conditions / R.M. Belyakova, V.A. Polukhin, N.I. Sidorov // Russian Metallurgy (Metally). – 2019. – V. 2019. – I. 2. – P. 108-115. DOI: 10.1134/S0036029519020058.

17. **Полухин, В.А.** Моделирование аморфных металлов / В.А. Полухин, Н.А. Ватолин. – М.: Наука, 1985. – 288 с.
18. **Suryanarayana, C.** Bulk metallic glasses / C. Suryanarayana, A. Inoue. – 2nd ed. – Boca Raton, London, New York: CRC Press, 2017. – 542 p. DOI: 10.1201/9781315153483.
19. **Yang, J.Y.** Hydrogen permeation of $Pd_{60}Cu_{40}$ alloy covered $V-15Ni$ composite membrane in mixed gases containing H_2S / J.Y. Yang, C. Nishimura, M. Komaki // Journal of Membrane Science. – 2008. – V. 309. – I. 1- 2. – P. 246-250. DOI: 10.1016/j.memsci.2007.10.036.
20. **Ishikawa, K.** Hydrogen permeation in anisotropic $Nb-TiNi$ two phase alloys formed by forging and rolling / K. Ishikawa, S. Tokui, K. Aoki // International Journal of Hydrogen Energy. – 2017. – V. 42. – I. 16. – P.11411-11421. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2017.03.127.
21. **Jayalakshmi, S.** Characteristics of $Ni-Nb$ -based metallic amorphous alloys for hydrogen-related energy applications / S. Jayalakshmi, V.S. Vasantha, E. Fleury, M. Gupta // Applied Energy. – 2012. – V. 90. – I. 1. – P. 94-99. DOI: 10.1016/j.apenergy.2011.01.040.
22. **Wang, Y.I.** Direct measurement of hydrogen diffusivity through Pd -coated Ni -based amorphous metallic membranes / Y.I. Wang, J.Y. Suh, Y.S. Lee, et al. // Journal of Membrane Science. – 2013. – V. 436. – P. 195-201. DOI: 10.1016/j.memsci.2013.02.040.
23. **Robertson, I.M.** Hydrogen embrittlement under stress / I.M. Robertson, P. Sofnis, A. Nagao, et al. // Metallurgical and Materials Transactions B. – 2015. – V. 46. – I. 3. – P. 1085-1103. DOI: 10.1007/s11663-015-0325-y.
24. **Luo, W.M.** Highly hydrogen permeable $Nb-Ti-Co$ hypereutectic alloys containing much primary bcc- (Nb,Ti) phase // W.M. Luo, K. Ishikawa, K. Aoki // International Journal of Hydrogen Energy. – 2012. – V. 37. – I. 17. – P. 12793-12797. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2012.06.005.
25. **Kim, S.-M.** Hydrogen permeability and crystallization kinetics in amorphous $Ni-Nb-Zr$ alloys / S.-M. Kim, D. Chandra, N.K. Pal, et al. // International Journal of Hydrogen Energy. – 2012. – V. 37. – I. 4. – P. 3904-3913. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2011.04.220.
26. **Полухин, В.А.** Специфика формирования кластерных структур Фриауфа, $2D$ -упаковок кагеме и фаз Лавеса при гидрировании сплавов титана. Кинетика водорода / В.А. Полухин, Р.М. Белякова // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2019. – Вып. 11. – С. 345-355. DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.345.
27. **Paglieri, S.N.** Hydrogen permeability, thermal stability and hydrogen embrittlement of $Ni-Nb-Zr$ and $Ni-Nb-Ta-Zr$ amorphous alloy membranes / S.N. Paglieri, N.K. Pal, M.D. Dolan, et al // Journal of Membrane Science. – 2011. – V. 378. – I. 1-2. – P. 42-50. DOI: 10.1016/j.memsci.2011.04.049.
28. **Polukhin, V.A.** Presolidification changes in the structural-dynamic characteristics of glass-forming metallic melts during deep cooling, vitrification, and hydrogenation / V.A. Polukhin, N.I. Sidorov, N.A. Vatolin // Russian Metallurgy (Metally). – 2019. – V. 2019. – I. 8. – P. 758-780. DOI: 10.1134/S0036029519080123.
29. **Chiang, W.-C.** Hydrogen permeation in $Fe_{40}Ni_{38}Mo_4B_{18}$ and $Fe_{81}B_{13.5}Si_{3.5}C_2$ amorphous alloys / W.-C. Chiang, W.-D. Yeh, J.-K. Wu // Materials Letters. – 2005. – V. 59. – I. 19-20. – P. 2542-2544. DOI: 10.1016/j.matlet.2005.03.042.
30. **Shariq, A.** Studying nearest neighbor correlations by atom probe tomography (APT) in metallic glasses as exemplified for the $Fe_{40}Ni_{40}B_{20}$ glassy ribbons / A. Shariq, T. Al-Kassab,

- R. Kirchheim // Journal of Alloys and Compounds. – 2012. – V. 512. – I. 1. – P. 270-277. DOI: 10.1016/j.jallcom.2011.09.079.
31. **Du, S.W.** Crystallization and magnetic properties of $Fe_{40}Ni_{38}B_{18}Mo_4$ amorphous alloy / S.W. Du, R.V. Ramanujan // Journal of Non-Crystalline Solids. – 2005. – V.351. – I. 37-39. – P. 3105-3113. DOI: 10.1016/j.jnoncrysol.2005.07.028.
32. **Vatolin, N.A.** Simulation of the influence of hydrogen on the structural properties of amorphous iron / N.A. Vatolin, V.A. Polukhin, R.M. Belyakova, E.A. Pastukhov // Materials Science and Engineering. – 1988. – V. 99. – I. 1-2. – P. 551-554. DOI: 10.1016/0025-5416(88)90396-5.
33. **Pastukhov, E.A.** Short order and transport in amorphous palladium materials / E.A. Pastukhov, N.I. Sidorov, V.A. Polukhin, V.P. Chentsov // Deffect an Diffusium Forum. – 2009. – V. 283-286. – P. 149-154. DOI: 10.4028/www.scientific.net/DDF.283-286.149.
34. **Ухов, В.Ф.** Межчастичные взаимодействия в жидких металлах / В.Ф. Ухов, Н.А. Ватолин, Б.Р. Гельчинский, В.П. Бескачко, О.А. Есин. – М.: Наука, 1979. – 195 с.
35. **Полухин, В.А.** Моделирование разупорядоченных и наноструктурированных фаз // В.А. Полухин, Н.А. Ватолин. – Екатеринбург: Изд-во УрО РАН, 2011. – 462 с.
36. **Rodmacq, B.** Neutron diffraction study of the crystallization of hydrogenated $CuTi$ amorphous alloys / B. Rodmacq, P. Goudeau, J. Pannetier, A. Chamberod // Materials Science and Engineering. – 1988. – V. 97. – P. 391-394. DOI: 10.1016/0025-5416(88)90080-8.
37. **Ishikawa, K.** Microstructure and hydrogen permeability in $Nb-TiFe$ alloys / K. Ishikawa, S. Watanabe, K. Aoki // Journal of Alloys and Compounds. – 2013. – V. 566. – P. 68-72. DOI: 10.1016/j.jallcom.2013.02.174.
38. **Polukhin, V.A.** Formation of a intermediate order in metallic glasses and a long order in nanocrystalline alloys with allowance for the character of binding and the transformation of the short order in a melt / V.A. Polukhin, E.D. Kurbanova, N.A. Vatolin // Russian Metallurgy (Metally). – 2018. – V. 2018. – I. 2. – P. 95-109. DOI: 10.1134/S0036029518020167.
39. **Mizgalski, K.P.** The characterization of crystallization in Metglas 2826 MB Alloy / K.P. Mizgalski, O.T. Inal, F.G. Yost, M.M. Karnowsky // Journal of Materials Science. – 1981. – V. 16. – I. 12. – P. 3357-3364. DOI: 10.1007/BF00586297.
40. **Dos Santos, D.S.** Hydrogen solubility in amorphous and crystalline materials / D.S. Dos Santos, P.E.V. De Miranda // International Journal of Hydrogen Energy. – 1998. – V. 23. – I. 11. – P. 1011-1017. DOI: 10.1016/S0360-3199(98)00025-1.
41. **Yan, E.** Changes in microstructure, solidification path and hydrogen permeability of $Nb-Hf-Co$ alloy by adjusting Hf/Co ratio / E. Yan, L. Sun, F. Xu, et al. // International Journal of Hydrogen Energy. – 2016. – V. 41. I. 3. – P. 1391-1400. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2015.12.023.
42. **Suzuki, A.** Quantitative evaluation of hydrogen solubility and diffusivity of $V-Fe$ alloys toward the design of hydrogen permeable membrane for low operative temperature / A. Suzuki, H. Yukawa, T. Nambu, Y. Matsumoto, Y. Murata // Materials Transactions. – 2016. – V. 57. – I. 10. – P. 1823-1831. DOI: 10.2320/matertrans.MAW201604.

References:

1. **Burkhanov, G.S.** Splavy palladiya dlya vodorodnoi ehnergetiki [Palladium alloys for hydrogen energy] / G.S. Burkhanov, N.B. Gorina, N.B. Kol'chugina, N.R. Roshan // Rossiiskii khimicheskii zhurnal (Zhurnal Rossiiskogo khimicheskogo obshchestva im. D.I. Mendeleev). – 2006. – V. L. – № 4. – P. 36-40. (In Russian).

2. **Fontana, A.D.** Hydrogen permeation and surface properties of *PdAu* and *PdAgAu* membranes in the presence of *CO*, *CO₂* and *H₂S* / A.D. Fontana, N. Sirini, L.M. Cornaglia, A.M. Tarditi // *Journal of Membrane Science*. – 2018. – V. 563. – P. 351-359. DOI: 10.1016/j.memsci.2018.06.001.
3. **Goltsov, V.A.** Perspektivy vodorodnoi membrannoi tekhnologii: tekhnicheskie i rynochnye aspekty [Prospects of hydrogen membrane technology: technical and market aspects] / V.A. Goltsov, M.V. Goltsova, G.I. Zhironov, L.F. Goltsova, et al. // BERLIN – PM'2010. Fourth International Conference «Platinum metals in the modern industry, hydrogen energy and life maintenance in the future», Berlin, Germany, 31 May - 04 June 2010: proceedings. – M.: Asmi, 2010. – P. 80-86. (In Russian).
4. **Evard, E.A.** Hydrogen permeability of amorphous and recrystallized iron alloys / E.A. Evard, N.I. Sidorov, I.E. Gabis // *Technical Physics*. – 2000. – V. 45. – I. 3. – P. 377-379. DOI: 10.1134/1.1259639.
5. **Dolan, M.D.** Tubular vanadium membranes for hydrogen purification / M.D. Dolan, D.M. Viano, M.J. Langley, K.E. Lamb // *Journal of Membrane Science*. – 2018. – V. 549. – P. 306-311. DOI: 10.1016/j.memsci.2017.12.031.
6. **Belyakova, R.M.** Influence of *Ti–H* hydrides on interatomic interactions and on characteristics of *Ti* alloying membrane alloys based on *V–Ni* / R.M. Belyakova, V.A. Piven, N.I. Sidorov, V.A. Polukhin // *Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials*. – 2019. – I. 11. – P. 74-85. DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.074.
7. **Kozhakhmetov, S.** Alloys based on group 5 metals for hydrogen purification membranes / S. Kozhakhmetov, N. Sidorov, V. Piven, I. Sipatov I., I. Gabis, B. Arinov // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2015. – V. 645. – Supplement 1. – P. S36-S40. DOI: 10.1016/j.jallcom.2015.01.242.
8. **Palumbo, O.** New studies of the physical properties of metallic amorphous membranes for hydrogen purification / O. Palumbo, F. Trequattrini, S. Suchismita, et al. // *Challenges*. Special Issue: Selected papers from Thematic Meeting «Materials for Energy». – 2017. – V. 8. – I. 1. – Art. № 4. – 12 p. DOI: doi.org/10.3390/challe8010004.
9. **Fagundes, L.G.S.** Hydrogen diffusivity and solubility in a *Fe*–based amorphous metallic alloys / L.G.S. Fagundes, L.F.L. Torres, D.S. dos Santos // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2009. – V. 483. – I. 1-2. – P. 540-543. DOI: 10.1016/j.jallcom.2008.08.100.
10. **Ribeiro, M.** Hydrogen gas permeation through amorphous and partially crystallized *Fe₄₀Ni₃₈Mo₄B₁₈* / M. Ribeiro, L. F. Lemus, D. S. Dos Santos // *Materials Research*. – 2012. – V.15. – № 5. – P. 818-820. DOI: 10.1590/S1516-14392012005000104.
11. **Dolan, M.D.** Hydrogen transport properties of several vanadium-based binary alloys / M.D. Dolan, M.E. Kellam, K.G. McLennan, D. Liang, G. Song // *International Journal of Hydrogen Energy*. – 2013. – V. 38. – I. 23. – P. 9794-9799. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2013.05.073.
12. **Polukhin, V.A.** Structure of alloys *Pd_{1-x}Si_x, Fe_{1-x}P_x* in liquid and amorphous states / V.A. Polukhin, E.A. Pastukhov, N.I. Sidorov // *Physics of Metals and Metallography*. – 1984. – V. 57. – I. 3. – P. 176-179.
13. **Belyakova, R.M.** Spatial arrangement of the fragmented phases in nanostructured 3d metal alloys during a change in the melt composition and cooling conditions / R.M. Belyakova, V.A. Polukhin, L.K. Rigmant // *Russian Metallurgy (Metally)*. – 2010. – V. 2010. – I. 8. – P. 681-698. DOI: 10.1134/S0036029510080045.
14. **Kovneristyi, Yu.K.** Ob"emno-amorfiziruyushchiesya metallicheskie splavy [Volumetric

- amorphizing metal alloys] / Yu.K. Kovneristyi. – M.: Nauka, 1999. – 80 p. (In Russian).
15. **Fukai, Y.** The metal-hydrogen system: basic bulk properties / Y. Fukai. – 2nd ed. In: Springer Series in Materials Science. – Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2004. – XII, 500 p.
16. **Belyakova, R.M.** Formation of the structure and the properties of multicomponent iron-based alloys as a function of hydrogenated melt solidification conditions / R.M. Belyakova, V.A. Polukhin, N.I. Sidorov // Russian Metallurgy (Metally). – 2019. – V. 2019. – I. 2. – P. 108-115. DOI: 10.1134/S0036029519020058.
17. **Polukhin, V.A.** Modelirovanie amorfnykh metallov [Modeling amorphous metals] / V.A. Polukhin, N.A. Vatolin. – M.: Nauka, 1985. – 288 p. (In Russian).
18. **Suryanarayana, C.** Bulk metallic glasses / C. Suryanarayana, A. Inoue. – 2nd ed. – Boca Raton, London, New York: CRC Press, 2017. – 542 p. DOI: 10.1201/9781315153483.
19. **Yang, J.Y.** Hydrogen permeation of $Pd_{60}Cu_{40}$ alloy covered $V-15Ni$ composite membrane in mixed gases containing H_2S / J.Y. Yang, C. Nishimura, M. Komaki // Journal of Membrane Science. – 2008. – V. 309. – I. 1- 2. – P. 246-250. DOI: 10.1016/j.memsci.2007.10.036.
20. **Ishikawa, K.** Hydrogen permeation in anisotropic $Nb-TiNi$ two phase alloys formed by forging and rolling / K. Ishikawa, S. Tokui, K. Aoki // International Journal of Hydrogen Energy. – 2017. – V. 42. – I. 16. – P.11411-11421. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2017.03.127.
21. **Jayalakshmi, S.** Characteristics of $Ni-Nb$ -based metallic amorphous alloys for hydrogen-related energy applications / S. Jayalakshmi, V.S. Vasantha, E. Fleury, M. Gupta // Applied Energy. – 2012. – V. 90. – I. 1. – P. 94-99. DOI: 10.1016/j.apenergy.2011.01.040.
22. **Wang, Y.I.** Direct measurement of hydrogen diffusivity through Pd -coated Ni -based amorphous metallic membranes / Y.I. Wang, J.Y. Suh, Y.S. Lee, et al. // Journal of Membrane Science. – 2013. – V. 436. – P. 195-201. DOI: 10.1016/j.memsci.2013.02.040.
23. **Robertson, I.M.** Hydrogen embrittlement under stress / I.M. Robertson, P. Sofnis, A. Nagao, et al. // Metallurgical and Materials Transactions B. – 2015. – V. 46. – I. 3. – P. 1085-1103. DOI: 10.1007/s11663-015-0325-y.
24. **Luo, W.M.** Highly hydrogen permeable $Nb-Ti-Co$ hypereutectic alloys containing much primary bcc- (Nb,Ti) phase // W.M. Luo, K. Ishikawa, K. Aoki // International Journal of Hydrogen Energy. – 2012. – V. 37. – I. 17. – P. 12793-12797. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2012.06.005.
25. **Kim, S.-M.** Hydrogen permeability and crystallization kinetics in amorphous $Ni-Nb-Zr$ alloys / S.-M. Kim, D. Chandra, N.K. Pal, et al. // International Journal of Hydrogen Energy. – 2012. – V. 37. – I. 4. – P. 3904-3913. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2011.04.220.
26. **Polukhin, V.A.** Spetsifika formirovaniya klasternykh struktur Friaufa, $2D$ -upakovok kagome i faz Lavesa pri gidrirovanii splavov titana. Kinetika vodoroda [The specifics of the formation of Friauf cluster structures, $2D$ - packaging of the kagome and Laves phases during the hydrogenation of titanium alloys. Kinetics of hydrogen] / V.A. Polukhin, R.M. Belyakova // Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials. – 2019. – I. 11. – P. 345-355. DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.345. (In Russian).
27. **Paglieri, S.N.** Hydrogen permeability, thermal stability and hydrogen embrittlement of $Ni-Nb-Zr$ and $Ni-Nb-Ta-Zr$ amorphous alloy membranes / S.N. Paglieri, N.K. Pal, M.D. Dolan, et al // Journal of Membrane Science. – 2011. – V. 378. – I. 1-2. – P. 42-50. DOI: 10.1016/j.memsci.2011.04.049.

28. **Polukhin, V.A.** Presolidification changes in the structural–dynamic characteristics of glass-forming metallic melts during deep cooling, vitrification, and hydrogenation / V.A. Polukhin, N.I. Sidorov, N.A. Vatolin // *Russian Metallurgy (Metally)*. – 2019. – V. 2019. – I. 8. – P. 758-780. DOI: 10.1134/S0036029519080123.
29. **Chiang, W.-C.** Hydrogen permeation in $Fe_{40}Ni_{38}Mo_4B_{18}$ and $Fe_{81}B_{13.5}Si_{3.5}C_2$ amorphous alloys / W.-C. Chiang, W.-D. Yeh, J.-K. Wu // *Materials Letters*. – 2005. – V. 59. – I. 19-20. – P. 2542-2544. DOI: 10.1016/j.matlet.2005.03.042.
30. **Shariq, A.** Studying nearest neighbor correlations by atom probe tomography (APT) in metallic glasses as exemplified for the $Fe_{40}Ni_{40}B_{20}$ glassy ribbons / A. Shariq, T. Al-Kassab, R. Kirchheim // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2012. – V. 512. – I. 1. – P. 270-277. DOI: 10.1016/j.jallcom.2011.09.079.
31. **Du, S.W.** Crystallization and magnetic properties of $Fe_{40}Ni_{38}B_{18}Mo_4$ amorphous alloy / S.W. Du, R.V. Ramanujan // *Journal of Non-Crystalline Solids*. – 2005. – V. 351. – I. 37-39. – P. 3105-3113. DOI: 10.1016/j.jnoncrysol.2005.07.028.
32. **Vatolin, N.A.** Simulation of the influence of hydrogen on the structural properties of amorphous iron / N.A. Vatolin, V.A. Polukhin, R.M. Belyakova, E.A. Pastukhov // *Materials Science and Engineering*. – 1988. – V. 99. – I. 1-2. – P. 551-554. DOI: 10.1016/0025-5416(88)90396-5.
33. **Pastukhov, E.A.** Short order and transport in amorphous palladium materials / E.A. Pastukhov, N.I. Sidorov, V.A. Polukhin, V.P. Chentsov // *Defect and Diffusion Forum*. – 2009. – V. 283-286. – P. 149-154. DOI: 10.4028/www.scientific.net/DDF.283-286.149.
34. **Ukhov, V.F.** Mezhdachastichnye vzaimodeistviya v zhidkikh metallakh [Interparticle interactions in liquid metals] / V.F. Ukhov, N.A. Vatolin, B.R. Gel'chinskii, V.P. Beskachko, O.A. Esin. – M.: Nauka, 1979. – 195 p. (In Russian).
35. **Polukhin, V.A.** Modelirovanie razuporyadochennykh i nanostrukturirovannykh faz [Simulation of disordered and nanostructured phases] // V.A. Polukhin, N.A. Vatolin. – Ekaterinburg: Izd-vo UrO RAN, 2011. – 462 p. (In Russian).
36. **Rodmacq, B.** Neutron diffraction study of the crystallization of hydrogenated $CuTi$ amorphous alloys / B. Rodmacq, P. Goudeau, J. Pannetier, A. Chamberod // *Materials Science and Engineering*. – 1988. – V. 97. – P. 391-394. DOI: 10.1016/0025-5416(88)90080-8.
37. **Ishikawa, K.** Microstructure and hydrogen permeability in $Nb-TiFe$ alloys / K. Ishikawa, S. Watanabe, K. Aoki // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2013. – V. 566. – P. 68-72. DOI: 10.1016/j.jallcom.2013.02.174.
38. **Polukhin, V.A.** Formation of a intermediate order in metallic glasses and a long order in nanocrystalline alloys with allowance for the character of binding and the transformation of the short order in a melt / V.A. Polukhin, E.D. Kurbanova, N.A. Vatolin // *Russian Metallurgy (Metally)*. – 2018. – V. 2018. – I. 2. – P. 95-109. DOI: 10.1134/S0036029518020167.
39. **Mizgalski, K.P.** The characterization of crystallization in Metglas 2826 MB Alloy / K.P. Mizgalski, O.T. Inal, F.G. Yost, M.M. Karnowsky // *Journal of Materials Science*. – 1981. – V. 16. – I. 12. – P. 3357-3364. DOI: 10.1007/BF00586297.
40. **Dos Santos, D.S.** Hydrogen solubility in amorphous and crystalline materials / D.S. Dos Santos, P.E.V. De Miranda // *International Journal of Hydrogen Energy*. – 1998. – V. 23. – I. 11. – P. 1011-1017. DOI: 10.1016/S0360-3199(98)00025-1.
41. **Yan, E.** Changes in microstructure, solidification path and hydrogen permeability of $Nb-Hf-Co$ alloy by adjusting Hf/Co ratio / E. Yan, L. Sun, F. Xu, et al. // *International Journal of Hydrogen Energy*. – 2016. – V. 41. I. 3. – P. 1391-1400. DOI:

10.1016/j.ijhydene.2015.12.023.

42. **Suzuki, A.** Quantitative evaluation of hydrogen solubility and diffusivity of *V – Fe* alloys toward the design of hydrogen permeable membrane for low operative temperature / A. Suzuki, H. Yukawa, T. Nambu, Y. Matsumoto, Y. Murata // *Materials Transactions*. – 2016. – V. 57. – I. 10. – P. 1823-1831. DOI: 10.2320/matertrans.MAW201604.

Original paper

HYDROGEN PERMEABILITY OF AMORPHOUS, NANO- AND CRYSTALLINE ALLOYS BASED ON IRON AND NICKEL

V.A. Polukhin, N.I. Sidorov, R.M. Belyakova

Institute of Metallurgy, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.457

Abstract: The kinetics of hydrogen permeability and diffusion in hydrogenated membrane alloys based on *Fe* and *Ni* have been investigated, which have functional characteristics, structural strength and thermal stability, and are a promising alternative to expensive palladium alloys. The strength characteristics, thermal stability and resistance to hydrogen embrittlement have been studied. The mechanisms of structuring, diffusion and permeability of hydrogen in crystalline, amorphous, nanocrystalline states are considered. For membrane alloys, a particularly important aspect is the combination in open structures (amorphous and bcc), while for hydrogen accumulation, in addition to transport channels (diffusion and permeability), high-density intermetallic clusters are also required. It is noted that, during long-term operation, due to the appearance of dense cluster configurations of intermediate ordering, which shorten the diffusion channels, the transport of hydrogen through them begins to decrease.

Keywords: *membrane alloys, amorphous structure, interatomic bonds, clusters, hydrogenation, glass transition, sorption, diffusion, permeability, intermetallic compounds, hydrides, hydrogen energy, molecular dynamics.*

Полухин Валерий Анатольевич – д.ф.-м.н., главный научный сотрудник ФГБУН «Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук»

Сидоров Николай Иванович – к.х.н., старший научный сотрудник ФГБУН «Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук»

Белякова Римма Михайловна – к.т.н., старший научный сотрудник ФГБУН «Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук»

Valeriy A. Polukhin – Dr. Sc., Chief Researcher, Institute of Metallurgy of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences

Nikolay I. Sidorov – Ph. D., Senior Researcher, Institute of Metallurgy of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences

Rimma M. Belyakova – Ph. D., Senior Researcher, Institute of Metallurgy of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences

Поступила в редакцию/received: 20.07.2020; после рецензирования/revised: 14.08.2020; принята/accepted 18.08.2020.