

Моделирование каталитических процессов в источниках тока на протонной проводимости на суперкомпьютерах «Ломоносов» и «Чебышёв»

**Варламов Дмитрий, В.М. Волохов, Т.С. Зюбина,
Г.А. Покатович, А.В. Волохов, А.В. Пивушков**

*Институт проблем химической
физики РАН, Черноголовка,
Московская область*

dima@icp.ac.ru



Работа выполнена при поддержке Министерства
образования и науки Российской Федерации (соглашение
№ 8026 от 10.07.2012)

Научный сервис в сети Интернет, Абрау-2013

Физико-химическая сущность задачи

В исследовании были промоделированы основные стадии процессов, происходящих в *водородных низкотемпературных топливных элементах*.

Моделирование проводилось в рамках метода функционала плотности с учетом градиентной коррекции (DFT/PBE) и периодических граничных условий.

Моделирование проводилось на примере расчета каталитических **анодных** и катодных процессов, происходящих на поверхности катализатора Pt₁₉, нанесенного на оксидный носитель SnO₂, и процессов адсорбции воды на поверхность мембраны, в качестве которой взят кристалл дигидрата мезитиленсульфокислоты



Детальное моделирование на микроуровне элементарных процессов и детального механизма электрокатализа и транспортных процессов в полимерных топливных элементах (ПТЭ) ведет к улучшению контроля над химическими реакциями внутри топливных элементов и делает возможным конструирование наиболее оптимальных катализаторов как с точки зрения эффективности процессов, так и со стороны ценообразования и экологичности.

Это один из путей к удешевлению производства ПТЭ за счет уменьшения стоимости платиновых катализаторов, преодоления энергетических потерь в реакции восстановления кислорода, и увеличения времени жизни электродов и мембран, повышение экологичности производства, эксплуатации и утилизации ПТЭ.