РОЛЬ ВАЛЕНТНОГО ЗАРЯДА В ПРОЦЕССЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ В ВОДОРОДНОЙ ПОДСИСТЕМЕ В СИСТЕМАХ ТИТАН-ВОДОРОД И НИКЕЛЬ-ВОДОРОД

И.В. Богданов1,\*), Л.А. Святкин1), И.П. Чернов1)

1) НИ ТПУ, г. Томск, Россия

\*) e-mail: ivb34@tpu.ru

Согласно экспериментальным данным, атомы водорода в решётке металла могут образовывать собственную подсистему, способную к накоплению энергии при её возбуждении. В результате водород в процессе воздействия электромагнитным полем выходит из металлов при температуре ниже, чем при тепловом нагреве. В работе /1/ проведены сравнительные исследования электрического и теплового воздействия на выход водорода из никеля и титана. Из никеля при электрическом нагреве температура выхода Н на 250ºС ниже, чем при тепловом, а из титана температура выхода такая же, как и при тепловом нагреве. Целью данной работы является изучение особенностей распределения валентной плотности при отклонении атома Н из равновесного положения в междоузлии в системах Ni–H и Ti–H, вызванным электрическим полем, сопровождающим электрический нагрев.

Все расчеты выполнялись в рамках теории функционала электронной плотности методом псевдопотенциала, реализованным в пакете программ ABINIT. В работе рассчитан перенос заряда по Бадеру и силы, действующие на атомы в системах Ni–H и Ti–H при смещении атома Н из равновесного положения в решетке металла. В работе показано, что в результате перераспределения валентного заряда, обусловленного смещением из положения равновесия атома Н, силы, действующие на атомы водорода, ближайшие к смещаемому атому в решетке металла, превышают силы, возникающие на атомах Ni в системе Ni–H, и заметно меньше сил, действующих на атомы Ti в системе Ti–H.

ЛИТЕРАТУРА

1. Yu.I. Tyurin, V.S. Sypchenko, N.N. Nikitenkov, Hongru Zha, I.P. Chernov, // Int. J. Hydrogen Energy, 2019, Vol. 4, p. 20223.