



Введение

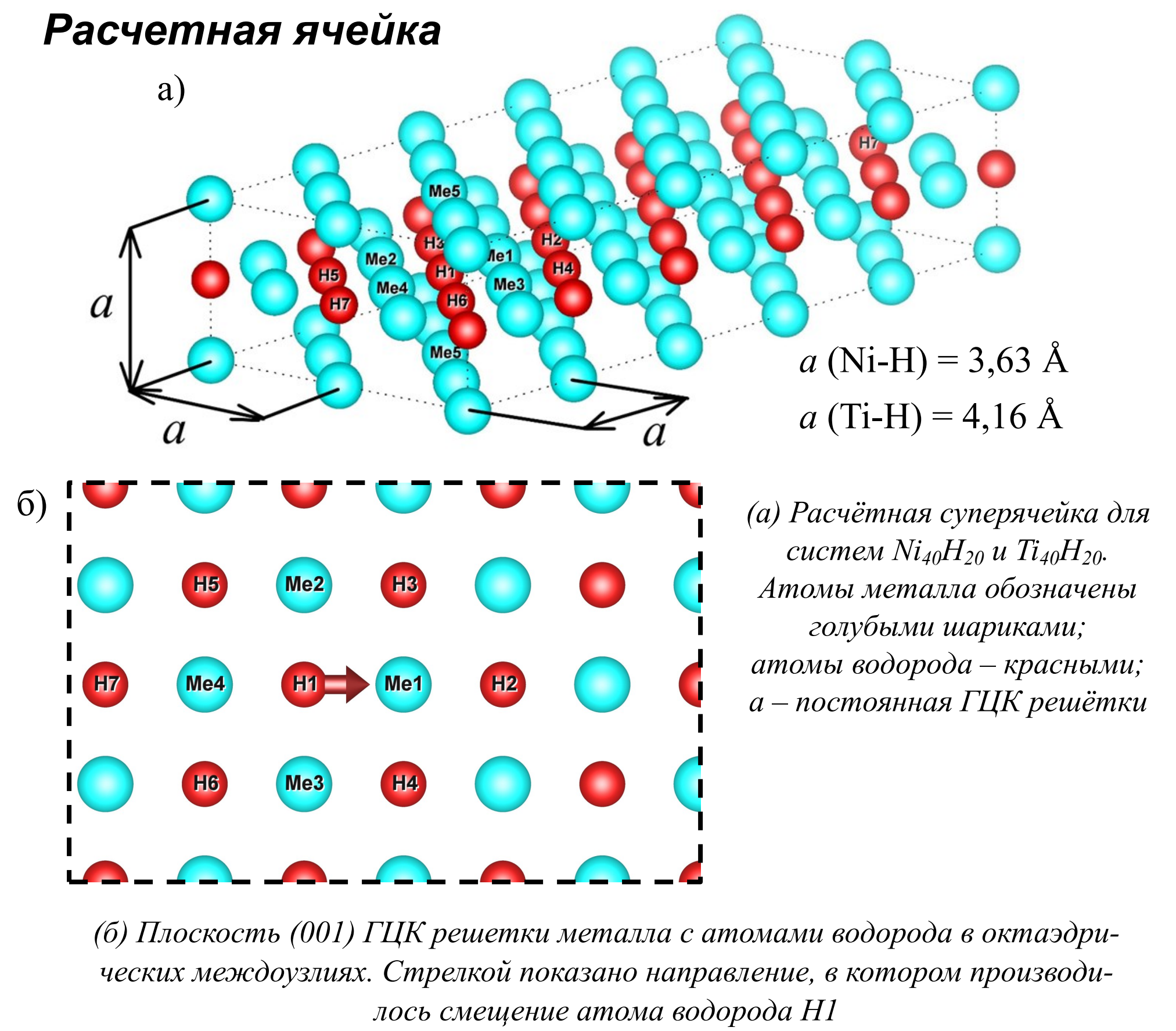
Согласно экспериментальным данным, атомы водорода в решётке металла могут образовывать собственную подсистему, способную к накоплению энергии при её возбуждении. В результате водород в процессе воздействия электромагнитным полем выходит из металлов при температуре ниже, чем при тепловом нагреве. Согласно сравнительным экспериментальным исследованиям электрического и теплового воздействия на выход водорода из никеля и титана, из никеля при электрическом нагреве температура выхода H на 250°C ниже, чем при тепловом, а из титана температура выхода практически такая же, как и при тепловом нагреве. Ответ на вопрос о различии в реакции водородной подсистемы в титане и никеле на локальное воздействие может быть получен с помощью изучения перераспределения валентной электронной плотности в результате воздействия, промоделированного смещением одного из атомов водорода из равновесного положения в решетке металла. Целью данной работы явилось изучение из первых принципов особенностей перераспределения валентной электронной плотности при отклонении атома H из равновесного положения в междоузлии в системах Ni-H и Ti-H.

Метод и детали расчета

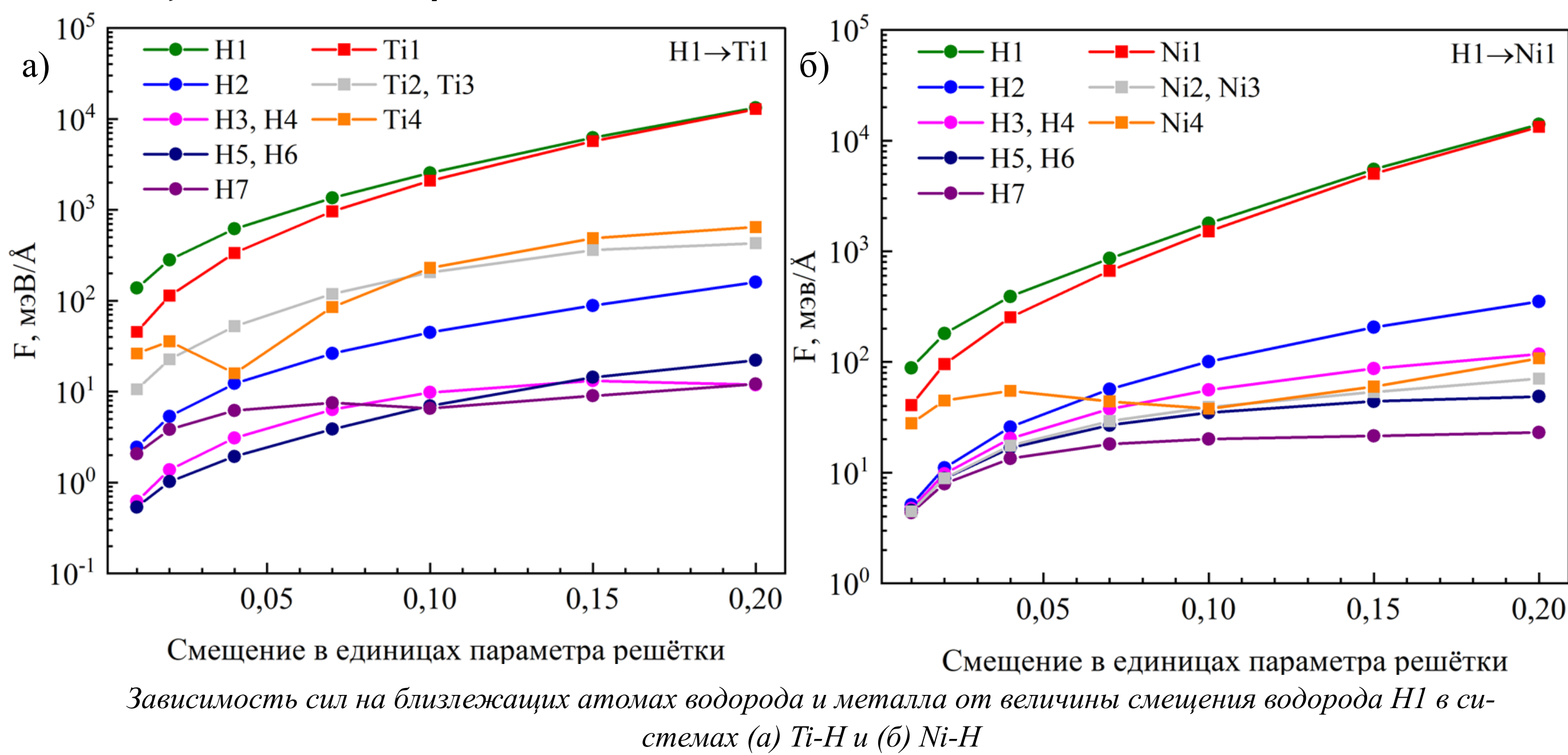
Расчёты из первых принципов были выполнены в рамках теории функционала электронной плотности методом оптимизированного сохраняющего норму псевдопотенциала Вандербиля, реализованным в пакете программа ABINIT. Обменно-корреляционные эффекты учитывались с использованием обобщенного градиентного приближения в форме Пердю-Бурке-Эрнцерхофа (PBE).

Расчётная ячейка представляла собой блок 2×5×1 ГЦК ячеек металла с атомами водорода в октаэдрических междоузлиях одной из плоскостей (001) решётки. Эффект внешнего воздействия на атом водорода моделировался смещением одного из атомов водорода из равновесного положения в междоузлии. Были рассчитаны перенос заряда по Бадеру и силы, действующие на атомы металла и водорода в моделируемом неравновесном состоянии. Используемая в расчетах модель в силу краевых эффектов ограничена в исследовании эффективности внешнего воздействия только вдоль одного из кристаллографических направлений.

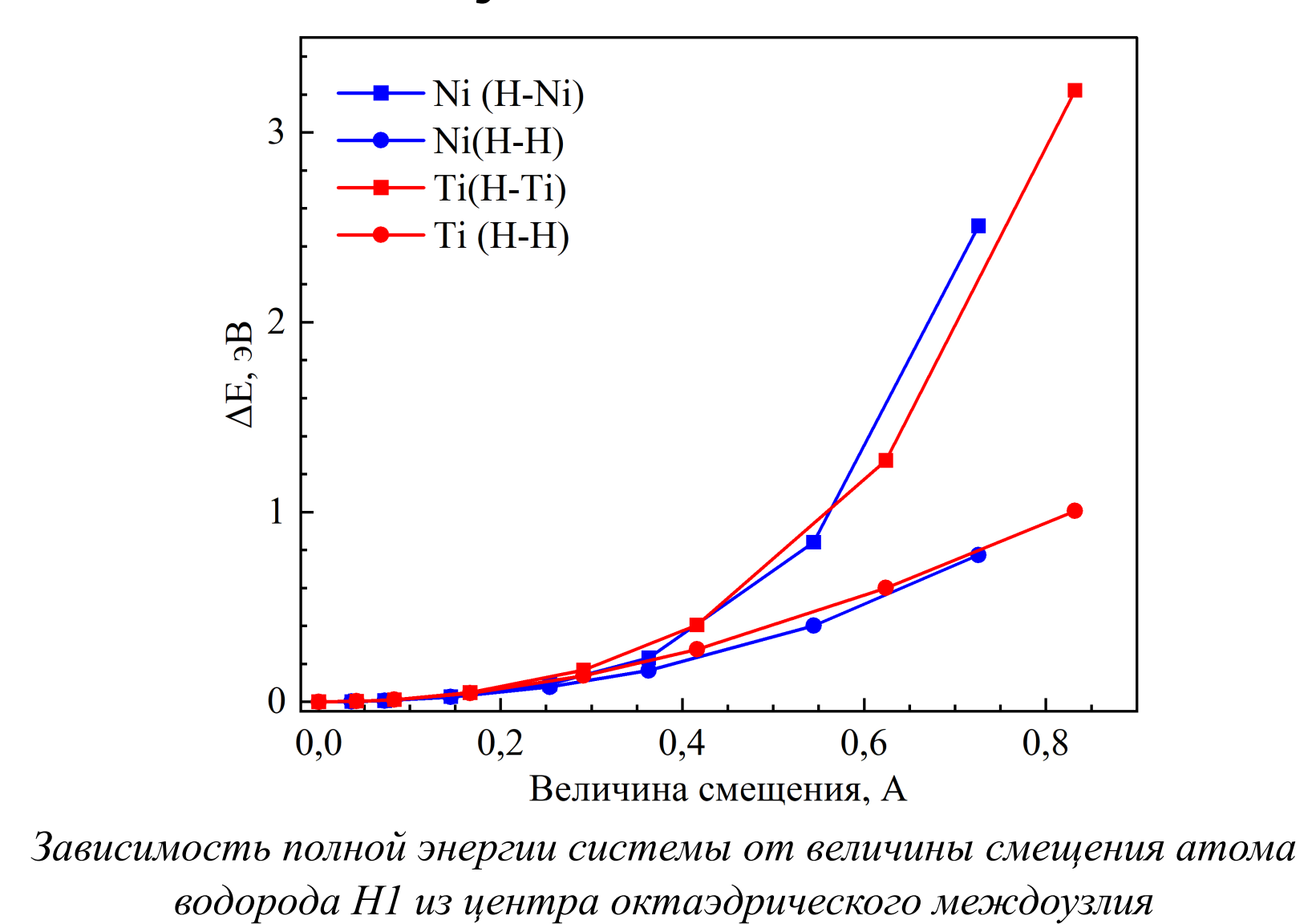
Расчетная ячейка



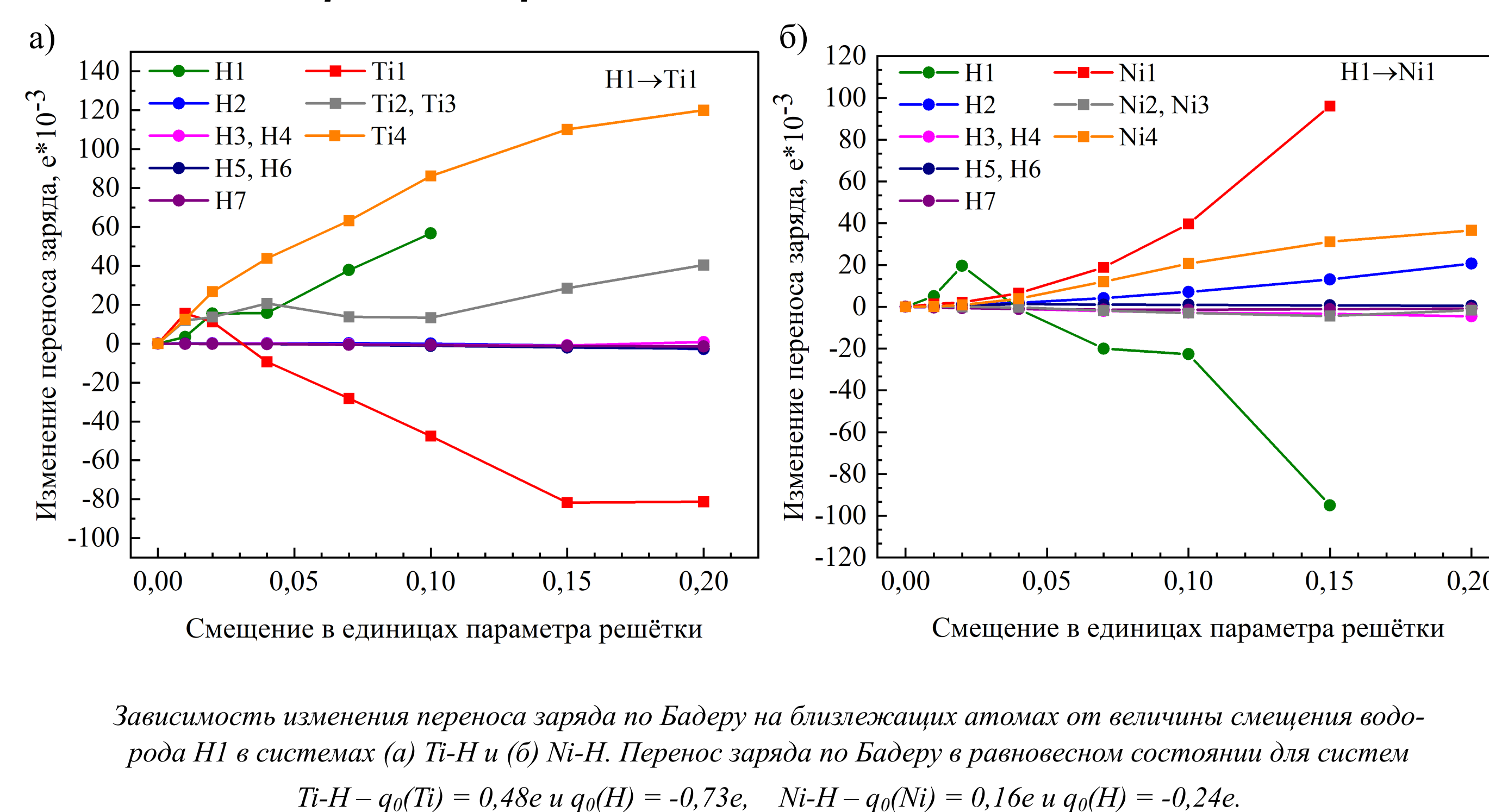
Силы, возникающие на атомах систем Me-H



Профиль потенциальной ямы октаэдрического междоузлия



Изменение переноса заряда на атомах систем Me-H



Заключение

В работе изучена из первых принципов реакция валентной электронной плотности систем Ti-H и Ni-H на локальное смещение одного из атомов водорода из центра октаэдрического междоузлия в направлении соседнего атома металла. Были рассчитаны перенос заряда по Бадера и всилы, действующие на атомы металла и водорода в моделируемом неравновесном состоянии. Согласно результатам расчётов:

- Возбуждение водородной подсистемы в твёрдых растворах проявляется за счет возникновения на атомах водорода значительных сил при осуществлении локального воздействия в следствие пологого дна потенциальной ямы, в которой находится водород, и перераспределения электронной плотности.
- Перераспределение валентного заряда на атомах водорода, обусловленного смещением из положения равновесия атома H, в системе Ti-H значительно меньше, чем в Ni-H, как следствие силы, действующие на атомы водорода ближайшие к смещаемому атому, превышают силы, возникающие на атомах Ni в системе Ni-H, и заметно меньше сил, действующих на атомы Ti в системе Ti-H.
- Для систем Ni-H и Ti-H при смещении одного из атомов водорода из равновесного положения связь между ближайшими к нему несмещёнными атомами водорода и атомами металла ослабевает.