

Рис.5 График нормы функции $g(x, t)$

На рис.5 изображена норма $\|g(x, t)\|$ в пространстве $L_1[-l, l]$. Нетрудно заметить, что норма невязки стремится к нулю, а следовательно приближенное решение стремится к точному

Список литературы:

1. Fisher R.A. The wave of advance of advantageous genes // Annu. Eugenics. – 1937. – V. 7. – P. 255–369.
2. Колмогоров А.Н., Петровский Н.Г., Пискунов Н.С. // Бюл. МГУ. Сер. А. Математика и Механика. – 1937. – Т. 1, № 6. – С. 1-16.
3. Самко С.Г., Килбас А.А., Маричев О.И. Интегралы и производные дробного порядка и некоторые их приложения. – Минск: Наука и техника, 1987. – 688 с.
4. Прозоров А.А., Трифонов А.Ю., Шаповалов А.В. Асимптотики одномерного нелокального уравнения Фишера-Колмогорова-Петровского-Пискунова с аномальной диффузией // Известия вузов физика. -2015.- Т.7.- (в печати)

Ab initio исследование диффузии водорода в титане

Т.И. Спиридонова¹, А.В. Бакулин^{2,3}, С.Е. Кулькова^{2,3}
tistpu@mail.ru

Научный руководитель: профессор, д.ф.м.н. С.Е. Кулькова

¹ Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

² Институт физики прочности и материаловедения СО РАН,
 Россия, г.Томск, пр. Академический, 2/4, 634055

³ Национальный исследовательский Томский государственный университет,
 Россия, г.Томск, пр. Ленина, 30, 634050

Титан, являясь элементом IVB группы, активно используется в различных областях промышленности и медицине. Наличие легких примесей оказывает влияние на многие свойства материала. В частности наличие даже небольших концентраций водорода может приводить к ухудшению механических свойств материалов. Взаимодействие водорода с металлами широко изучалось на протяжении прошлого века, в том числе, и в материалах с ГПУ структурой [1-3], однако полученные результаты достаточно противоречивы в отношении предпочтительности диффузионных путей и высоты энергетического барьера. Понимание механизмов диффузии водорода, а также влияния примесей замещения на его диффузию в металлах и сплавах необходимо для улучшения механических свойств, функциональных материалов. Целью настоящей работы являлось изучение диффузии водорода в титане, а также влияния примесей на энергию активации и предпочтительность диффузионных путей.

Расчет электронной структуры титана в гексагональной фазе (α -Ti) и энергии взаимодействия металл-водород проводился методом проекционных присоединенных волн (PAW) [4] с обобщенным градиентным приближением PBE [6], реализованным программным первопринципным кодом VASP [5]. Энергия обрезания для плоских волн была равна 400 эВ. Сходимость считалась достигнутой, если разница в полных энергиях между двумя последовательными итерациями не превышала 0,01 мэВ. При интегрировании по зоне Бриллюэна использовалась сетка k-точек ($9 \times 9 \times 7$), полученная по схеме Монхорста-Пака. В расчетах использовалась суперячейка размером ($2 \times 2 \times 2$), содержащая шестнадцать атомов титана. Положения атомов в решетке релаксировались до достижения сил на атомах ~ 0.01 эВ/Å.

На Рис. 1 представлены шесть возможных путей диффузии атома водорода в титане. Были рассмотрены пути между октаэдрическими (O) и тетраэдрическими (T) позициями в решетке.

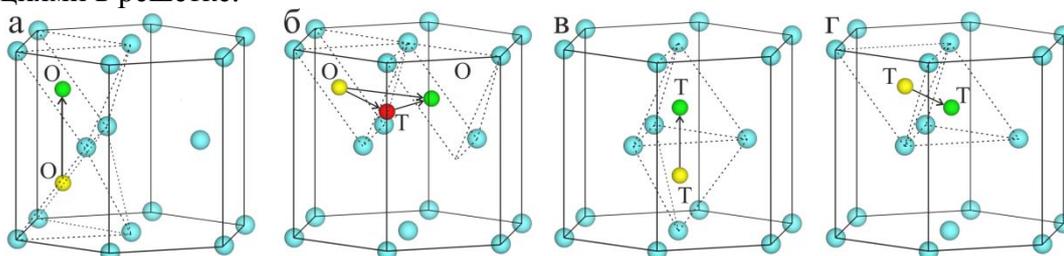


Рис. 1. Диффузионные пути водорода в α -Ti: между O-позициями вдоль $[0001]$ (а) и вдоль $[-12-10]$ и через промежуточную T-позицию (б); между T-позициями вдоль $[0001]$ (в) и вдоль $[4-403]$ (г). Начальное, конечное и промежуточное положение водорода показано желтым, зеленым и красным цветом.

Для нахождения наиболее энергетически выгодных диффузионных путей использовался метод восходящих изображений, Climbing Nudged Elastic Band method (CI-NEB) [7]. В данном расчете использовались пять промежуточных изображений между начальной и конечной позицией водорода в титане. Высота диффузионного барьера рассчитывалась по следующей формуле:

$$Q = E_{\text{saddle}} - E_0,$$

где E_{saddle} и E_0 – полная энергия системы с водородом в седловой и в начальной точках, соответственно.

Расчитанные значения энергетических барьеров при диффузии атома водорода в чистом титане в сопоставлении с результатами других теоретических расчетов [1-3] и с экспериментальными данными приведены в Таблице 1. Видно, что диффузия водорода наиболее предпочтительна между T-позициями вдоль направления $[000-1]$. Значение энергетического барьера лишь на 0,02 эВ выше, чем в работе [2], в которой использовался PAW-GGA метод. Результат для диффузии водорода между O-позициями в базальной плоскости превышает на 0,15 эВ значение, полученное в работе [1], но находится в хорошем согласии с данными [2]. Расчеты показали, что величина диффузионного барьера практически не зависит от направления миграции водорода между O-позициями. Данное заключение не согласуется с выводами авторов [1, 2]. Отметим, что меньшие значения были получены в работах [1-3] для диффузии водорода в направлении $[0001]$. В то же время выводы о барьерах между O-позициями, сделанные в работах [1,2], противоречат друг другу. В тоже время значения барьеров для диффузии между O и T позициями хорошо согласуются со значениями [1]. Поскольку в эксперименте используются поликристаллические

образцы титана, то экспериментальное значение является усредненной величиной по различным направлениям. Действительно, если усреднить значения барьеров для T-T_{down}, O-O_{down} и T-O-T, то полученное значение 0,53 эВ хорошо согласуется с экспериментальным значением 0,537 эВ [8].

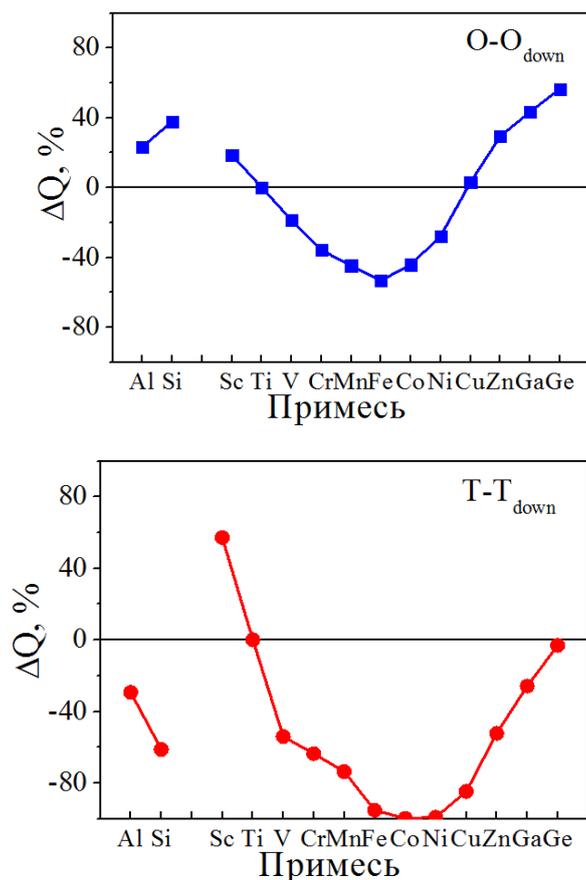
Таблица 1

Значения энергетических барьеров (Q, эВ) для диффузии водорода в α-Ti в сопоставлении с результатами других авторов и экспериментальными данными

| | O-O _{down} | O-O _{plane} | T-T _{down} | T-T _{plane} | T-O | O-T |
|-------------|----------------------|----------------------|---------------------|----------------------|-------|-------|
| Q (2×2×2) | 0,762 | 0,771 | 0,139 | 0,602 | 0,332 | 0,514 |
| Q [1] | 0,695 | 0,619 | – | – | 0,344 | 0,514 |
| Q [2] | 0,65 | 0,79 | 0,12 | 0,66 | 0,39 | 0,46 |
| Q [3] | 0.625 | – | 0,061 | – | 0,424 | 0,504 |
| Эксперимент | 0,537 [8], 0,636 [9] | | | | | |

На рисунке 1 приведены рассчитанные значения энергетических барьеров при диффузии водорода между октаэдрическими и тетраэдрическими позициями в направлении [000-1] в легированном титане.

Можно видеть, что при диффузии водорода вдоль пути T-T_{down} все рассматриваемые легирующие примеси, за исключением скандия, уменьшают величину диффузионного барьера и способствуют миграции водорода по тетраэдрическим позициям вдоль направления [000-1]. Максимальное уменьшение величины барьера наблюдается при легировании титана примесями кобальта и никеля. Если водород мигрирует вдоль пути O-O_{down}, то влияние примесей не столь однозначно. Из рисунка 1а можно видеть, что в этом случае простые металлы (Al, Ga, Ge), а также Si, Sc, Cu и Zn способствуют увеличению энергетического барьера, и, следовательно, препятствуют диффузии водорода. Как отмечалось выше, простые металлы и кремний отталкивают водород, обладая положительной энергией взаимодействия с атомом H. Данное обстоятельство может способствовать повышению энергии, необходимой для прохождения водородом мимо примеси простого металла, а, следовательно, увеличению диффузионного барьера. В случае легирования переходными металлами результат определяется конкуренцией электронных и структурных факторов.



а)

б)

Рисунок 1 - Относительное увеличение диффузионного барьера для атома водорода при внедрении примесей в α -титан

Отметим, что все переходные металлы, за исключением цинка, приводят к понижению энергии абсорбции водорода в О-позиции, то есть способствуют внедрению водорода в О-позицию, что приводит к повышению барьера диффузии из данной позиции.

Список литературы:

1. Han X.L., Wang Q., Sun D.L., Sun T., Guo Q. First-principles study of hydrogen diffusion in alpha Ti // *Int. J. Hydrogen Energy*. 2009. V. 34. – P. 3983–3987.
2. Connetable D., Huez J., Andrieu E., Mijoule C. First-principles study of diffusion and interaction of vacancies and hydrogen in hcp-titanium // *J. Phys.: Condensed Matter*. 2011. V.23. – P. 405401-1–14.
3. Lu Y., Zhang P. First-principles study of temperature-dependent diffusion coefficients: Hydrogen, deuterium, and tritium in α -Ti // *Journal of Applied Physics*. 2013. V. 113. – P. 193502-1–4.
4. Blöchl P.E. Projector augmented-wave method // *Phys. Rev. B*. 1994. V. 50. – P. 17953–17979.
5. Kresse G.P., Hafner J. Ab initio molecular-dynamics simulation of the liquid-metal-amorphous-semiconductor transition in germanium // *Phys. Rev. B*. 1994. V. 49. – P. 14251-14269.

6. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple // Phys. Rev. Lett. 1996. V. 77. – P. 3865-3868.
7. Henkelman G., Uberuaga B.P., Jónsson H. A climbing image nudged elastic band method for finding saddle points and minimum energy paths // J. Chem. Phys. 2000. V. 113. – P. 9901-9904.
8. Wasilewski R.J., Kehl G.L. Diffusion of hydrogen in titanium // Metallurgia. 1954. V. 50. – P.225-230.
9. Papazoglou T.P., Hepworth M.T. Diffusion of hydrogen in α -titanium // Trans. Met. Soc. AIME. 1968. V. 242. – P.682-687.

Анализ фазовых портретов параметров диффузионной плазмы термоэмиссионного преобразователя энергии

Тарасова Л.П.

tarasova.luda31@mail.ru

Научный руководитель: к.т.н., доцент, Зимин В.П., Национальный Исследовательский Томский Политехнический Университет

Аннотация. В процессе исследования проводился математический анализ экспериментальных распределений параметров плазмы, с целью выявления на фазовых портретах областей, в которых при некоторых параметрах диода в плазме объемная ионизация начинает конкурировать с поверхностной ионизацией. В результате исследования получены фазовые портреты, качественные оценки.

В работе [1] была поставлена задача и изложены первые результаты построения и исследования поведения на фазовых плоскостях распределений параметров плазмы в диффузионном режиме работы термоэмиссионного преобразователя (ТЭП). В настоящей работе излагаются результаты, полученные после уточнения как оцифрованных экспериментальных данных, так и постановки задачи. Наряду с экспериментальными результатами, представленными в [2], были учтены распределения параметров диффузионной плазмы работы [3]. Изменение постановки задачи заключалось в замене вида аппроксимирующей функции. Вместо логарифмического приближения была взята функция экспоненциального вида. Это связано с тем, что логарифмическая функция у эмиттера ($x=0$) имеет особенность, что затрудняет проведение корректную экстраполяцию экспериментальных данных в области у эмиттера.

Результаты и их обсуждение

Уточненные оцифрованные данные распределений параметров плазмы были получены для двух наборов параметров ТЭП.

Для первого набора параметров преобразователя температура эмиттера $T_E=1565$ К, температура коллектора $T_C=860$ К, межэлектродный зазор $d=0,16$ см варьировалось давление насыщенных паров цезия в резервуаре p_{Cs} , мм рт. ст.: 1 – 0,44; 2 – 1,0; 3 – 2,0. Распределения параметров плазмы снимались на вольтамперной характеристики (ВАХ) в точке тока короткого замыкания. На основании анализа кривых Рейзора эмиттера преобразователя (Mo) получена оценка плотности тока короткого замыкания $J_{кз}$, mA/cm²: 1 – 46,2; 2 – 35,7; 3 – 26,6.