

УДК 538.91:538.97

**Взаимодействие между атомами водорода в системе титан-водород:  
расчёты из первых принципов**

И.В. Богданов

Научный руководитель: к.ф.-м.н., Л.А. Святкин  
Национальный исследовательский Томский политехнический университет,  
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: [ivb34@tpu.ru](mailto:ivb34@tpu.ru)

**Interaction between hydrogen atoms in the titanium-hydrogen system:  
first-principle calculations**

I.V. Bogdanov

Scientific Supervisor: Ph.D., L.A. Svyatkin  
Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: [ivb34@tpu.ru](mailto:ivb34@tpu.ru)

**Abstract.** *An ab initio study of the reaction of the hydrogen subsystem in the Ti-H system on the local impact modeled by shifting the hydrogen atom from the octahedral site was conducted. The excess energy of the system with displaced hydrogen atom and forces acting on displaced and nearest atoms. It was shown that during the displacement of a hydrogen atom the forces on the nearest H atoms appeared and characterized with values that are less by order of magnitude than the force acting on the nearest Ti atoms. The difference between the forces on hydrogen and titanium atoms tends to decrease as the displacement of one hydrogen atom increases.*

**Key words:** *titanium, hydrogen, first-principle calculations, hydrogen subsystem.*

**Введение**

Благодаря таким свойствам как высокая прочность и коррозионная стойкость титан и его сплавы нашли широкое применение в таких немаловажных отраслях как аэрокосмическая промышленность, медицина и автомобилестроение. Однако, как и остальные металлы, титан подвержен водородному охрупчиванию, выражающемуся в резком падении пластичности, что в итоге может привести к разрушению титанового изделия. В ходе исследования [1] было выявлено, что при электрическом нагреве для образцов из никеля и палладия температура выхода H на 250 °C и 205 °C ниже, чем при линейном тепловом нагреве. В том же исследовании показано, что в случае наводороженного титанового образца такой эффект наблюдается в гораздо меньшей мере. Однако при воздействии электронного пучка для титана при линейном нагреве так же, как и для других металлов, наблюдается значительный сдвиг максимальной интенсивности десорбции водорода из образца в сторону более низких температур. Приведённые экспериментальные данные могут указывать на то, что для возбуждения водородной подсистемы в системе Ti-H необходимо больше энергии, чем в случае никеля или палладия. Причина отсутствия возбуждения водородной подсистемы в Ti-H при сообщении ей небольших значений энергии может быть изучена с помощью первопринципных методов расчета электронного строения системы титан-водород. Смещая атома водорода из равновесного положения в октаэдрическом междоузлии, можно промоделировать результат локального воздействия, вызванных взаимодействием атома с электронами или электромагнитными полями, и выявить роль распределения электронной плотности в процессах возбуждения водородной подсистемы. Целью данной работы является первопринципное исследование особенностей взаимодействия H-H и H-Ti при отклонении одного из атомов водорода относительно равновесного положения в междоузлии в ГЦК решетке титана.

### Материалы и методы исследования

Расчеты из первых принципов были выполнены в рамках теории функционала электронной плотности с использованием оптимизированного сохраняющего норму псевдопотенциала Вандербильта, реализованного в программе ABINIT. Для описания обменно-корреляционных эффектов использовалось приближение обобщенного градиента в форме Пердю, Бурке и Эрнцера [2]. Расчётная ячейка представляла собой блок  $2 \times 5 \times 1$  ГЦК ячеек титана с атомами водорода в октаэдрических междуузлиях одной из плоскостей (001) решётки. Эффект от столкновения электрона с атомом водорода моделировался в виде смещения одного из атомов водорода (H1 на рисунке 1) из равновесной позиции. На каждой итерации самосогласования собственные значения гамильтониана рассчитывались в сетке  $k$ -точек  $5 \times 2 \times 10$  всей зоны Бриллюэна. Энергия обрезания при разложении волновой функции по базису плоских волн составила 820 эВ.

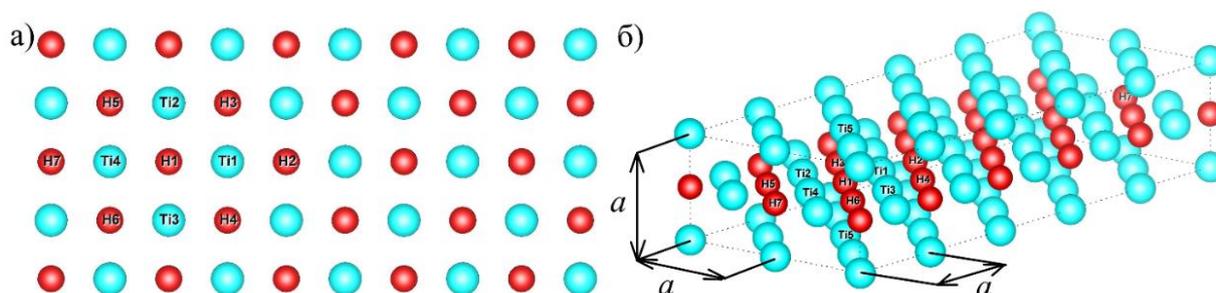


Рис. 1. Плоскость (001) ГЦК решетки титана с атомами водорода в октаэдрических междуузлиях (а); расчётная суперячейка системы  $Ti_{40}H_{20}$  (б)

### Результаты и обсуждение

Смещение атома водорода осуществлялось в двух направлениях: в сторону ближайшего атома титана T1 и в сторону ближайшего водорода H2 (оранжевая и красная стрелки на рисунке 1 (а)). В обоих случаях в потенциальной яме, в которой находится смещаемый атом водорода, наблюдается почти плоское дно (рисунок 2), радиус которого составляет  $\sim 2\%$  параметра решётки. Для значений отклонения, не превышающих  $4\%$  параметра решётки, в обоих рассмотренных направлениях смещения наблюдаются почти одинаковые зависимости полной энергии системы от величины смещения атома водорода, в то время как при больших смещениях водороду энергетически выгоднее смещаться к ближайшему атому водорода.

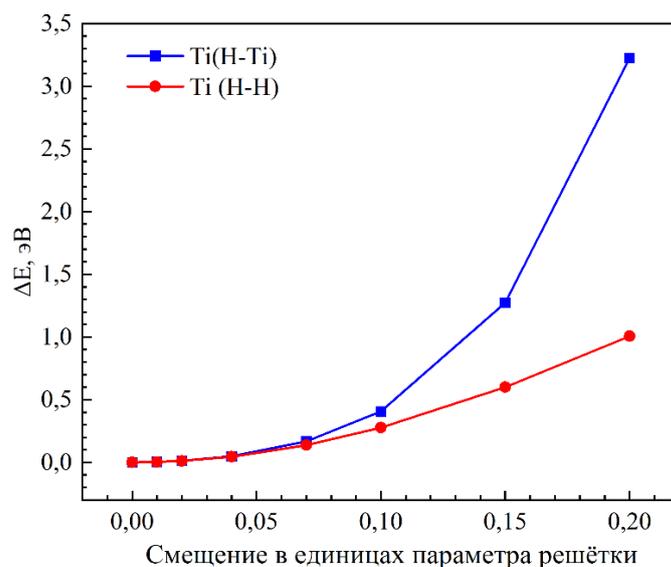


Рис. 2. Зависимость полной энергии системы от величины смещения атома водорода из центра октаэдрического междуузлия

Вследствие перераспределения электронной плотности на близлежащие атомы водорода и титана действуют силы (рисунок 3), стремящиеся вернуть систему в основное состояние и увеличивающиеся при росте отклонения водорода из равновесного положения. При небольших смещениях водорода Н1 в обоих случаях силы, появляющиеся на атомах водорода, ближайших к атому Н1, в несколько раз меньше, чем силы, действующие на атомы титана. Относительно малые значения сил, приложенных к несмещённым атомам водорода, свидетельствуют о том, что смещение атома водорода из положения равновесия до 0,1 параметра решетки титана не будет приводить к заметному возбуждению водородной подсистемы. Поскольку с ростом величины смещения отличие в силах, действующих на атомы водорода и титана, уменьшается, то при высокоэнергетических воздействиях на систему Ti-H, при которых возможны смещения атома водорода относительно равновесного положения в октаэдрическом междуузлии на расстояния больше, чем 0,1 параметра решётки титана, может наблюдаться значительное возбуждение водородной подсистемы.

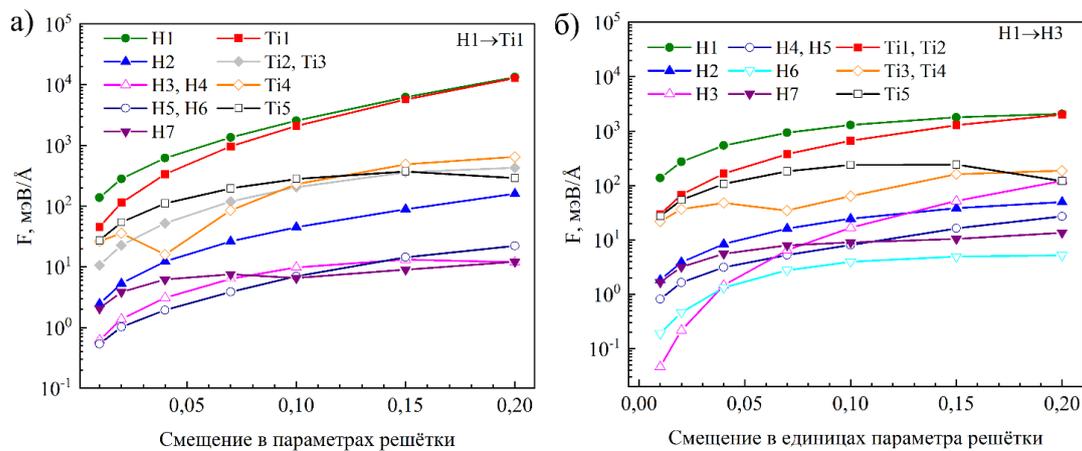


Рис. 3. Зависимость значения сил, действующих на ближайшие к смещённому атому Н1 атомы титана и водорода от величины смещения а) к ближайшему атому титана, б) к ближайшему атому водорода

### Заключение

В работе в рамках теории функционала электронной плотности методом оптимизированного сохраняющего норму псевдопотенциала Вандерbiltа были рассчитаны полные энергии ГЦК решетки гидрида титана с атомами водорода, внедрённым в октаэдрические междуузлия в плоскости (001) и силы, действующие на атомы системы, в зависимости от величины смещения одного из атомов водорода. Результаты расчётов свидетельствуют о том, что атом водорода в октаэдрическом междуузлии находится в потенциальной яме, характеризующейся пологим дном. Силы, действующие на атомы водородной подсистемы, заметно меньше, чем силы, приложенные к атомам Ti, при смещении одного из атомов водорода на 0,1 параметра решётки титана. С ростом величины смещения отличие в силах, действующих на атомы H и Ti уменьшается. Таким образом, значительное возбуждение водородной подсистемы в ГЦК решетке титана возможно лишь при высокоэнергетических воздействиях на нее.

### Список литературы

1. Tyurin Yu.I., Sypchenko V.S., Nikitenkov N.N., Hongru Zhang, Chernov I.P. Comparative study of the hydrogen isotopes yield from Ti, Zr, Ni, Pd, Pt during thermal, electric current and radiation heating // International Journal of Hydrogen Energy. – 2019. – Vol. 44. – P. 20223–20238.
2. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple // Phys. Rev. Lett. – 1996. – Vol. 77, № 18. – P. 3865–3868.