

## РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ В СИСТЕМЕ НИКЕЛЬ–ВОДОРОД

У Мэняо

Научный руководитель: Л.А. Святкин

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г.Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: [2113400552@qq.com](mailto:2113400552@qq.com)

## ELECTRON DENSITY DISTRIBUTION IN NICKEL–HYDROGEN SYSTEM

Wu Mengyao

Scientific Supervisor: L.A. Svyatkin

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: [2113400552@qq.com](mailto:2113400552@qq.com)

***Abstract.** The results of first-principle calculations of electron density distribution and density difference between electrons with different spins in the Ni-H system is presented. Placements of hydrogen in the interstitial sites of nickel lattice leads to an increase in the covalent component of the chemical bond between the nearest H and Ni atoms. Analysis of the difference in the density of electrons with spin up and spin down in the Ni-H system shows that with increasing hydrogen concentration in nickel this difference of electron density in an interstitial region decreases.*

**Введение.** Исследование системы никель–водород представляет интерес, поскольку никель широко используется для изготовления защитных покрытий от коррозии в химически активных средах и часто подвергается интенсивному воздействию водородом. Растворение и накопление водорода в никеле приводит к водородному охрупчиванию материала. Для понимания особенностей взаимодействия водорода с никелем на микроскопическом уровне необходимо изучить атомную и электронную структуру системы никель–водород. Целью настоящего исследования явилось изучение из первых принципов распределение электронной плотности в системы никель–водород в зависимости от положения и концентрации примеси в никеле.

**Метод и детали расчета.** В работе в рамках теории функционала электронной плотности методами псевдопотенциала и проекционных плоских волн, реализованными в пакете программ ABINIT [1], была проведена оптимизация параметров решетки и релаксация положений всех атомов в расчетной ячейке чистого никеля и системы никель–водород с относительной концентрацией атомов водорода  $X = H/Ni$  равной 0,125 и 1,0. Обменно-корреляционные эффекты рассматривались в приближении градиентного потенциала PBE [2]. Самосогласование считалось достигнутым, когда сходимости полной энергии составляла  $\sim 0,03$  мэВ. Релаксация решетки считалась завершенной, когда силы, действующие на каждый атом расчетной ячейки, становились меньше 50 мэВ/Å. Набор k-точек составлял  $7 \times 7 \times 10$  для твердого раствора  $Ni_8H$  и  $14 \times 14 \times 10$  для чистого Ni и твердого раствора NiH. Распределение электронной плотности было рассчитано в чистом Ni и в твердых растворах  $Ni_8H$  и NiH, в которых атомы водород размещались либо в октаэдрических, либо в тетраэдрических междоузлиях. В работе также была вычислена разность плотностей электронов со спином вверх и со спином вниз.

**Результаты и выводы.** Результаты расчетов распределения электронной плотности и разности плотностей электронов со спинами вверх и вниз для чистого никеля представлены на рис. 1. Из рис. 1б видно, что в чистом никеле в области каждого атома есть максимум положительной разности плотности электронов со спином вверх и со спином вниз (красные пятна), а в межатомной области кристалла разность плотности электронов со спином вверх и со спином вниз имеет отрицательное значение.

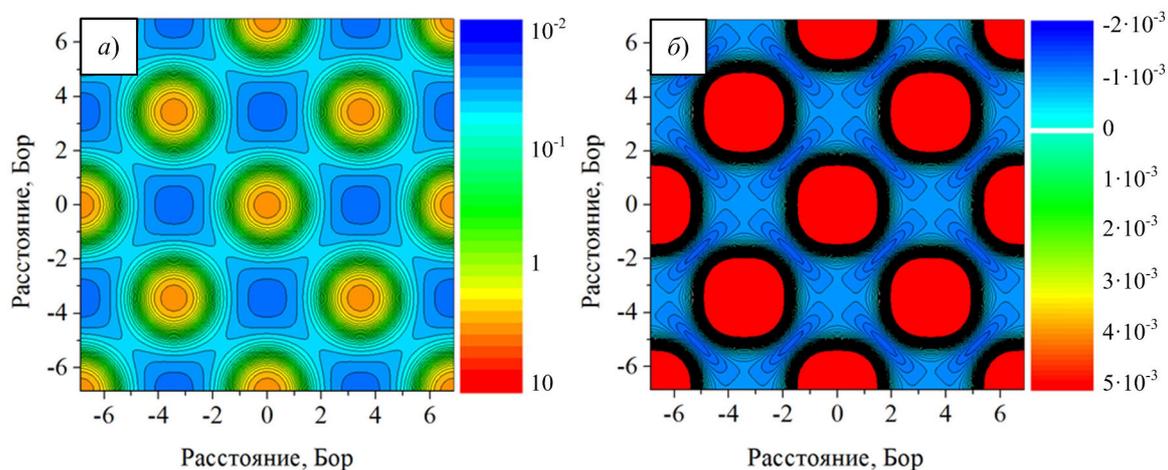


Рис. 1. Распределение электронной плотности (а) и разность плотностей электронов со спинами вверх и вниз (б) в плоскости (200) чистого Ni

Расчеты полной энергии системы Ni–H показали, что при концентрациях водорода в никеле  $X = 0,125$  (твердый раствор Ni<sub>8</sub>H) и  $X = 1,0$  (твердый раствор NiH) атому H энергетически более выгодно занимать октаэдрические междуузлия в решетке металла. Поэтому на рис. 2 и 3 представлено распределение электронной плотности и разности плотностей электронов со спином вверх и со спином вниз в твердых растворах Ni<sub>8</sub>H и NiH с октаэдрической координацией атомов водорода.

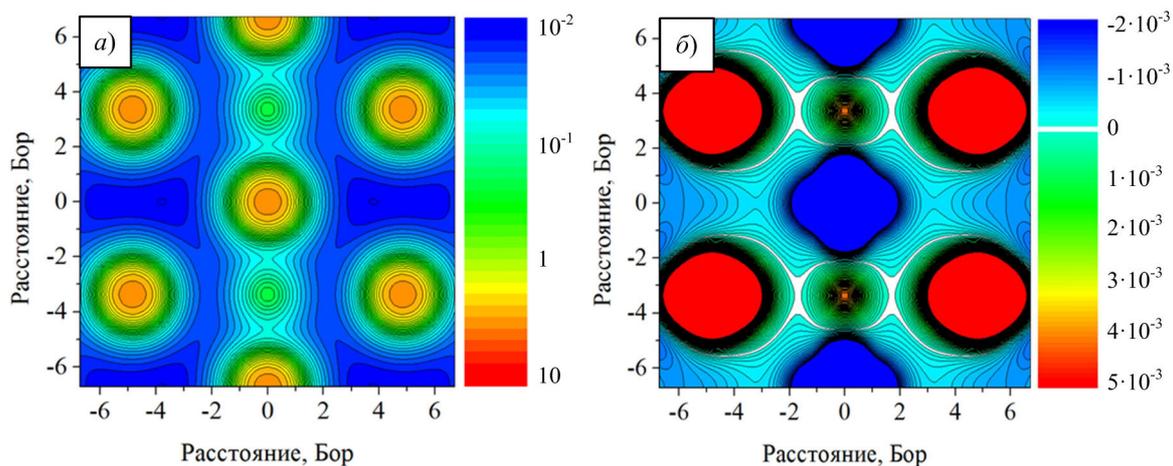


Рис. 2. Распределение электронной плотности (а) и разность плотностей электронов со спинами вверх и вниз (б) в плоскости (200) твердого раствора Ni<sub>8</sub>H с октаэдрической координацией атомов H

Из рис. 2а видно, что размещение атома водорода в октаэдрических междуузлиях никеля с концентрацией  $X = 0,125$  (рис. 2а) приводит к возникновению общих изолиний распределения электронной плотности, охватывающих атомы H и ближайшие к ним атомы Ni, что указывает на усиление ковалентной составляющей химической связи между атомами. При этом на этих атомах Ni наблюдаются большие области с отрицательной разностью плотностей электронов со спинами вверх и

вниз (рис. 2б), что говорит о перематничивании этих атомов. Вдали от атомов водорода наблюдается распределение зарядовой плотности разности плотностей электронов со спинами вверх и вниз такое же, как и в чистом Ni. Анализ распределения электронной плотности в Ni<sub>8</sub>H с тетраэдрической координацией атомов водорода показал, что общих изолиний, охватывающих соседние атомы Ni и H, меньше, что говорит о более слабой связи водорода в этих междоузлиях по сравнению с октаэдрическими. Также при тетраэдрической координации атомов водорода на всех атомах никеля разность плотностей электронов со спином вверх и вниз имеет положительные значения как в чистом никеле, а на атомах водорода эта разность принимает отрицательные значения. Стоит отметить, что размещение водорода в никеле с относительной концентрацией  $X = H/Ni = 0,125$  значительно понижает уровень электронной плотности в межатомной области кристалла.

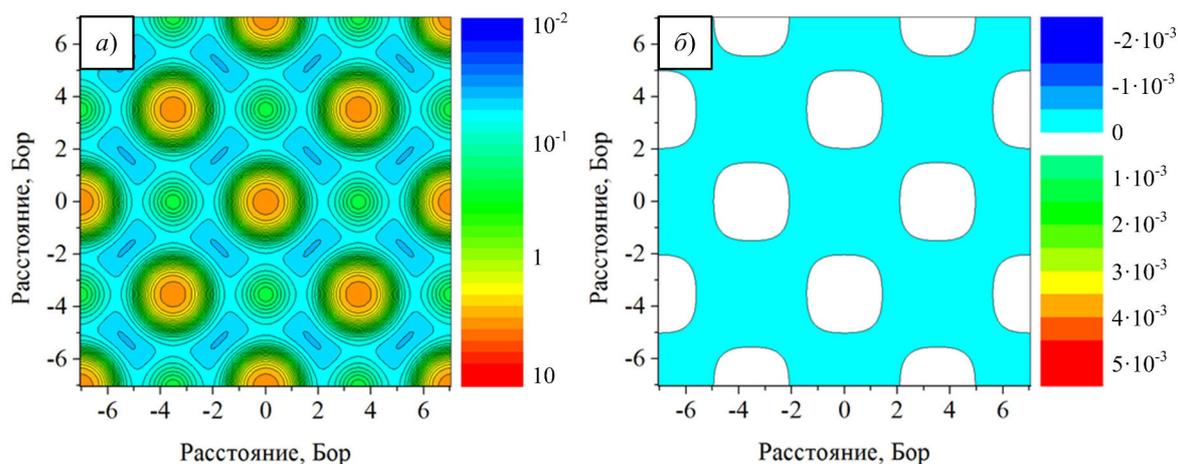


Рис. 3. Распределение электронной плотности (а) и разность плотностей электронов со спинами вверх и вниз (б) в плоскости (200) твердого раствора NiH с октаэдрической координацией атомов H

Анализ рис. 1а и 3а показал, что уровень электронной плотности в межатомной области твердого раствора NiH с октаэдрической координацией атомов водорода значительно выше, чем в чистом Ni. Однако общие контуры изолиний между соседними атомами H и Ni, наблюдаемые в твердом растворе Ni<sub>8</sub>H (рис. 2а), в твердом растворе NiH отсутствуют (рис. 3а). При тетраэдрической координации атомов водорода распределение электронной плотности в твердом растворе NiH имеет качественно такой же вид, как и в твердом растворе Ni<sub>8</sub>H с октаэдрической координацией атомов водорода (рис. 2а). Анализ распределения разности плотностей электронов со спином вверх и со спином вниз в системе Ni–H, показал, что с ростом концентрации водорода в никеле разность плотностей электронов со спином вверх и со спином вниз в межатомной области уменьшается. При относительной концентрации водорода  $X = 1,0$  эта разность плотностей во всем кристалле близка к нулю, что свидетельствует об исчезновении магнитного момента (рис. 3б). Магнитный момент атома водорода сильно зависит от его расположения в решетке никеля.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. ABINIT – abinit [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.abinit.org> – 21.12.16.
2. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple // Phys. Rev. Lett. – 1996. – Vol. 77. – № 18. – P. 3865-3868.