УДК 538.931

ПОТЕНЦИАЛЫ МЕЖАТОМНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В СИСТЕМАХ Pd-H и Ni-H

ПОЛЕТАЕВ Г.М., КУЛАБУХОВА Н.А., СТАРОСТЕНКОВ М.Д.

Алтайский государственный технический университет им И.И. Ползунова,
656038, г. Барнаул, пр. Ленина, 46

АННОТАЦИЯ. Для моделирования примеси водорода в Pd и Ni построены потенциалы межатомного взаимодействия H-H, Pd-H, Ni-H. Потенциалы H-H строились с учетом результатов первопринципных расчетов, полученных другими авторами. Потенциалы Pd-H и Ni-H подбирались по экспериментальным данным энергии абсорбции, энергии активации надбарьерной диффузии водорода в металле, энергии связи с вакансией.

Ключевые слова: потенциал межатомного взаимодействия, молекулярная динамика, металл, водород, энергия абсорбции, энергия активации диффузии.

ВВЕДЕНИЕ

Взаимодействие водорода с металлами остается предметом интенсивного изучения на протяжении последнего столетия [1]. С одной стороны, это обусловлено практическим интересом в использовании системы металл-водород: создание радиационностойких материалов, фильтров для получения чистого водорода, в том числе для разделения изотопов, аккумуляция и хранение легких газов в металлах и сплавах, проблема транспортировки водорода. С другой стороны, это связано с нежелательным воздействием водорода на свойства материалов (охрупчивание, коррозия, распространение трещин) [2].

Атомы водорода, обладая уникально малой массой и размерами по сравнению с другими атомами внедрения в металлах, имеют исключительно высокую диффузионную подвижность [3 - 5]. Несмотря на то, что водород вызывает деформацию металла (дилатационного характера), даже при больших концентрациях тип кристаллической решетки часто остается прежним, благодаря чему водородные воздействия на металл могут быть сравнительно «мягкими». Кроме того, зачастую после такого воздействия можно эвакуировать водород из металла без ухудшения свойств последнего. Это обстоятельство открывает возможность управляемого воздействия водорода на металлы, то есть водородной обработки материалов [3].

В настоящее время существует ряд экспериментальных методов исследования системы металл-водород. Но при этом результаты, полученные экспериментально, характеризуются, как правило, большим разбросом данных и не раскрывают природы многих процессов, обусловленных присутствием водорода в металле [1, 3]. В особенности это относится к металлам со слабой растворимостью водорода. Для получения детальной информации используют теоретические методы, среди которых можно выделить первопринципные методы и метод компьютерного моделирования с применением полуэмпирических потенциалов. Первопринципные методы являются физически более обоснованными, однако они имеют ряд ограничений, не позволяющих исследовать динамику процессов в материалах, охватывающих нанометровый масштаб, связанных с трансформацией или миграцией различных дефектов структуры, тепловыми движениями атомов. Для изучения особенностей абсорбции и диффузии водорода как в кристаллической решетке, так и вблизи дефектов, влияния примеси водорода на подвижность самих дефектов, объяснения и прогнозирования изменения механических свойств материала необходимо использование компьютерного моделирования с применением более простых способов описания межатомных взаимодействий в моделях с относительно большим числом атомов. Для этого, как правило, используют полуэмпирические потенциалы, построенные на базе первопринципных расчетов и с учетом данных, полученных экспериментально.

Известно, что отличительными особенностями диффузии водорода и гелия в металлах, по сравнению с другими более тяжелыми атомами внедрения, являются исключительно малая энергия активации и квантовый характер диффузии при низких температурах, проявляющийся для водорода в чистых кристаллах вплоть до комнатной температуры [2, 3, 6, 7]. Так, при сверхнизких температурах возможен преимущественно квантовый механизм диффузии, заключающийся в подбарьерном, квантовом туннелировании атомов водорода между соседними междоузлиями. С ростом температуры и несовершенства кристаллической решетки металла вклад подбарьерной диффузии резко уменьшается, и в основном реализуются классические надбарьерные механизмы. При температурах выше комнатной диффузия водорода осуществляется практически надбарьерно [2, 3, 6, 7]. Этот факт позволяет исследовать диффузию легких внедренных атомов классическим методом молекулярной динамики при достаточно высоких температурах.

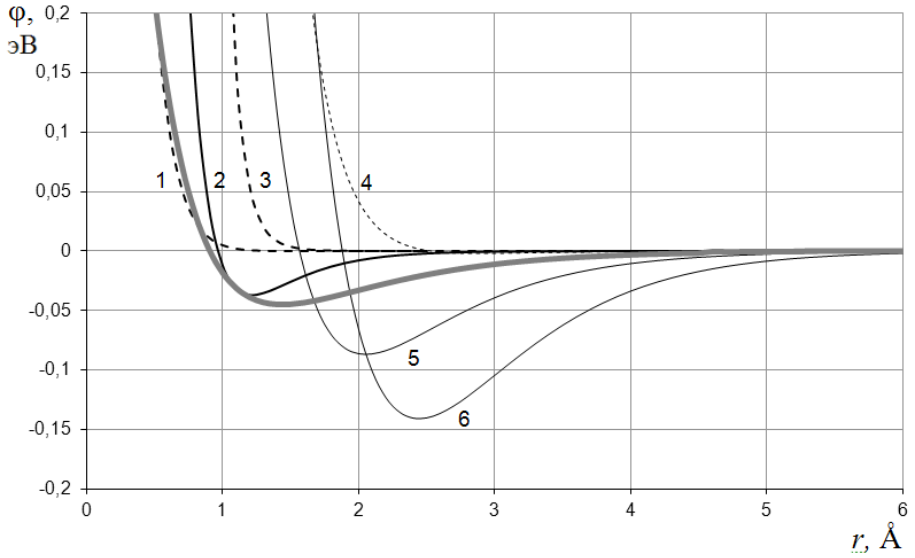
В настоящее время существует несколько типов потенциалов, описывающих взаимодействие атомов в системе металл-водород, отличающихся как методикой поиска параметров потенциалов, так и самим видом потенциальной функции. Большинство известных потенциалов построены на базе тех или иных первопринципных моделей, как правило, без учета экспериментальных данных по энергии активации диффузии водорода, энергии связи с дефектами-ловушками, дилатационных свойств и т. п. Эти данные рассчитываются уже потом, и чаще всего, упомянутые характеристики редко описываются одновременно хорошо одним типом потенциалов. Настоящая работа посвящена построению потенциалов межатомного взаимодействия в системах Pd-H и Ni-H с учетом известных типов потенциалов и экспериментальных данных по энергиям абсорбции, активации диффузии водорода, связи с точечными дефектами и т.д. Выбор металлов обусловлен повышенным вниманием к данным ГЦК металлам и относительно большим количеством полученных для них экспериментальных данных.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ H-H В МЕТАЛЛАХ

Молекулы водорода H_2, прилипая к свободной поверхности металла, диссоциируют на отдельные атомы вследствие значительного ослабления ковалентной связи [6]. В металлах, в кристаллической решетке и в области дефектов, водород пребывает в атомарном состоянии. Во второй половине прошлого века конкурировали две модели заряда водорода в металле: H^+ (протонная) и H^- (анионная). В восьмидесятых годах было выяснено, что реальная ситуация содержит черты обеих моделей. Методами ab initio было показано, что протон в металле в большинстве случаев экранируется электронами даже сильнее, чем в вакууме, и имеет отрицательный эффективный заряд, не кратный элементарному, вследствие участия электронов водорода в металлической связи [6].

Полуэмпирические потенциалы, описывающие взаимодействие атомов водорода друг с другом в металлах, можно разделить на две группы. В обоих случаях для получения параметров потенциалов используются результаты расчетов из первых принципов. Первая группа потенциалов использует расчеты взаимодействия атомов водорода в электронном газе определенной плотности, которая определяется в зависимости от металла [8 - 12]. В работе [10] показано, что эта связь значительно слабее, чем в вакууме. Другая группа потенциалов строится на базе характеристик металлического водорода (как правило, параметра решетки, энергии сублимации и модуля всестороннего сжатия), полученных первопринципными методами [13 - 15]. Потенциалы второй группы существенно отличаются от потенциалов первой группы более глубокой и расположенной правее (т. е. соответствующей большим межатомным расстояниям) потенциальной ямой (рис. 1). Следует заметить, что твердый моноатомный металлический водород с ГЦК решеткой существует при температурах близких к 0 К и чрезвычайно высоких давлениях – порядка 100 ГПа [16]. При давлении ниже этого значения образуется твердый молекулярный водород с ГПУ решеткой, в узлах которой располагаются молекулы H_2, имеющие относительно слабое взаимодействие друг с другом.

Одним из наиболее часто упоминаемых и используемых другими исследователями потенциалами взаимодействия атомов водорода друг с другом в металлах является потенциал Доу и Баскеса [8, 9], построенный методом погруженного атома. На рис. 1 изображена отталкивающая составляющая потенциала (потенциал 1). Как пишут сами авторы [8], они старались при построении потенциала делать как можно меньше допущений и учесть все аспекты электронной структуры при взаимодействии атомов. Вместе с тем, радиус действия потенциала ограничен только одной координационной сферой ГЦК решетки. Такой чрезвычайно маленький радиус «обрезания» потенциала снижает его достоверность, доверие вызывает только та часть потенциала, которая отвечает за отталкивание.



1 – в Pd и Ni [8, 9]; 2 – в Al [11]; 3 – в Ni [12]; 4 – в Pd и Ag [13]; 5 –в Al [14]; 6 –в ряде ГПУ металлов [15]. Жирной серой линией выделен потенциал, подобранный в настоящей работе

Рис. 1. Потенциалы взаимодействия H-H в металлах

На рис. 1 изображены потенциалы связи H-H из работ [8 - 15]: 1 - отталкивающая составляющая потенциала Доу и Баскеса, найденного методом погруженного атома, для связи H-H в Pd и Ni [8, 9]; 2 – парный потенциал из работы [11] для связи H-H в Al; 3 – потенциал, использованный в работе [12] для описания взаимодействия H-H в Ni (в работе [12], однако, говорится, что использовалась отталкивающая составляющая потенциала Доу и Баскеса, т. е. потенциал 1, но, как видно, авторы по каким-то соображениям, о которых не упомянули в статье, сместили его правее); 4 – потенциал из работы [13], учитывающий только отталкивание, для связи H-H в Pd и Ag; 5 – потенциал взаимодействия H-H в Al из работы [14]; 6 – потенциал взаимодействия H-H в ряде ГПУ металлов из работы [15]. Потенциалы 4, 5 и 6 принадлежат ко второй группе, т. е. построены с использованием характеристик металлического водорода. Они смещены правее относительно потенциалов первой группы вдоль оси расстояния между атомами. Кроме того, для них характерна более глубокая потенциальная яма.

При апробации потенциала 5 в работе [17] было выяснено, что из-за относительно глубокой потенциальной ямы при использовании потенциалов второй группы атомы водорода стремятся образовывать коагулянты, сближаясь друг с другом и понижая тем самым энергию системы. Энергия абсорбции в таком случае получается аномально низкой, что противоречит экспериментальным результатам (например, при концентрации 70 % водорода в Al средняя энергия абсорбции в работе [17] получилась -0,8 эВ, что в восемь раз ниже, чем для Pd, который, как известно, обладает рекордной растворимостью водорода). В связи с этим, при поиске потенциала в настоящей работе было принято решение ориентироваться только на потенциалы первой группы, а именно на потенциалы 1 и 2.

При подборе параметров потенциала H-H, помимо прочего, учитывались результаты первопринципных расчетов, полученные другими авторами. В работе [10], например, показано, что в электронном газе металла потенциал взаимодействия H-H сравнительно «мягкий» и имеет минимум ориентировочно при $r = 1{,}5$ Å. В работах [18] и [19] говорится, что энергия связи атомов водорода в соседних октаэдрических порах в железе и вольфраме (т. е. на расстояниях 2,03 и 2,22 Å) равны 0,044 и 0,02 эВ, соответственно.

Для описания взаимодействий H-H, а также Pd-H и Ni-H, в настоящей работе был выбран потенциал Морза:

$$\varphi(r_{ij}) = D\beta e^{-\alpha r_{ij}}\left(\beta e^{-\alpha r_{ij}} - 2\right), \tag{1}$$

где α, β, D – параметры потенциала, r_{ij} – расстояние между i-м и j-м атомами. Опыт применения данных потенциалов показывает, что с их помощью удается описать разнообразные свойства металлов и сплавов [20]. Парные потенциалы Морза сравнительно часто используются различными исследователями для описания межатомных взаимодействий в системах металл-водород, например [11, 13-15, 21]. Многочастичные потенциалы физически более обоснованы, но, принимая во внимание высокую погрешность данных, по которым подбираются параметры потенциалов, а также погрешность самих методик поиска параметров, выбор парных потенциалов обоснован. Кроме того, при молекулярно-динамическом моделировании водорода в металлах приходится использовать шаг интегрирования по времени на порядок меньше, чем в отсутствии водорода, из-за чего затраты машинного времени при моделировании водорода существенно выше. При этом парные потенциалы, по сравнению с многочастичными, требуют значительно меньше затрат машинного времени. Полученный в настоящей работе потенциал связи H-H показан на рис. 1 жирной серой линией.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ PD-H И NI-H

Потенциалы взаимодействия атомов металла с атомами водорода обычно строят с использованием первопринципных расчетов или экспериментальных данных, хотя иногда, как, например, в работах [11, 12], определяют как среднее потенциалов взаимодействия H-H и Me-Me (Me-Me – взаимодействие атомов металла друг с другом). При этом большинство потенциалов не позволяют одновременно хорошо описать такие экспериментально получаемые величины, как энергию абсорбции, энергию активации надбарьерной диффузии водорода в металле (при нормальных и высоких температурах), энергию связи с дефектами-ловушками (например, вакансией), дилатацию и т. д. Целью настоящей работы был поиск потенциалов взаимодействия, которые воспроизводили бы указанные экспериментальные данные.

Взаимодействия атомов металла друг с другом описывались многочастичными потенциалами Клери-Розато [22], построенными в рамках модели сильной связи. Потенциальная энергия i-го атома в этом случае находится с помощью выражения

$$U_i = \sum_j A\exp\left[-p\left(\frac{r_{ij}}{r_0}-1\right)\right] - \sqrt{\sum_j \xi^2 \exp\left[-2q\left(\frac{r_{ij}}{r_0}-1\right)\right]}. \tag{2}$$

Здесь A, p, q, ξ, r_0 – параметры потенциала; r_{ij} – расстояние между i-м и j-м атомами. Параметры потенциалов Клери-Розато были взяты из работы [22]. Данный потенциал хорошо зарекомендовал себя в ряде расчетов, выполненных методом молекулярной динамики [23].

Энергия абсорбции водорода – это работа, которую нужно затратить, чтобы поместить один атом водорода в объем металла с учетом работы разрыва связи H-H в молекуле двухатомного водорода H_2 (энергия диссоциации). Энергия абсорбции рассчитывалась по формуле

$$E_{ab} = \left(U_H - U_0\right) + \frac{1}{2}E_{дис}, \tag{3}$$

где U_0 – потенциальная энергия идеального кристалла металла; U_H – потенциальная энергия кристалла, содержащего атом водорода, с учетом релаксации атомной структуры; $E_{дис}$ – энергия диссоциации молекулы водорода H_2 ($E_{дис}$ = 4,485 эВ [1, 6, 10]). Для расчета величины U_H в расчетный блок кристалла Pd или Ni в октаэдрическую пору ГЦК решетки вводился атом водорода, затем проводилась динамическая релаксация и после нее охлаждение до 0 К.

Энергия связи водорода с вакансией E_{bv} рассчитывалась как разность потенциальной энергии расчетного блока, содержащего вакансию и атом водорода в октаэдрической поре на таком расстоянии друг от друга, которое исключает взаимодействие вакансии и водорода, и потенциальной энергии расчетного блока, содержащего атом водорода в вакансии. В обоих случаях перед расчетом энергии расчетного блока проводилась динамическая релаксация, после которой расчетный блок охлаждался до 0 К.

Энергию активации миграции точечного дефекта в молекулярно-динамической модели можно найти двумя методами: статическим и динамическим [23]. Статическим методом, при знании траектории миграции дефекта, определяется величина энергетического барьера на пути миграции. Динамический метод заключается в нахождении зависимости коэффициента диффузии от температуры $D(T)$ при введении в расчетный блок одного дефекта рассматриваемого типа (в данном случае атома водорода). Энергию миграции атома водорода E_m можно найти с помощью зависимости $\ln D(T^{-1})$, предварительно определив по графику тангенс угла наклона $tg\alpha$ прямой к оси абсцисс:

$$E_m = -ktg\alpha = -k\frac{\partial \ln D}{\partial (T^{-1})}, \tag{4}$$

где k − постоянная Больцмана, T – температура.

Динамический метод позволяет определить и предэкспоненциальный множитель в соответствующем уравнении Аррениуса. При этом он пропорционален концентрации дефектов:

$$D = \frac{c}{c'}D' = D_0' Nc \exp\left(-\frac{E^m}{kT}\right), \tag{5}$$

здесь c – концентрация рассматриваемых дефектов, для которой рассчитывается предэкспоненциальный множитель; c' – концентрация при введении одного дефекта в расчетный блок; D_0'- предэкспоненциальный множитель, получаемый с помощью компьютерного эксперимента из зависимости $D'(T)$ при введении единственного дефекта в расчетный блок; N – количество атомов в расчетном блоке. Множитель D_0' в уравнении Аррениуса (5) находится по пересечению графика $\ln D(T^{-1})$ с осью ординат [23].

Энергия активации надбарьерной диффузии водорода в Pd и Ni рассчитывалась в настоящей работе обоими методами. Механизм надбарьерной диффузии водорода в ГЦК металлах заключался, как правило, в последовательном пересечении октаэдрических и тетраэдрических пор, причем энергия активации миграции водорода из тетраэдрической поры в октаэдрическую близка к нулю. Поэтому при расчете статическим методом энергия активации определялась как разность энергий расчетного блока кристалла, содержащего атом водорода в октаэдрической поре и в позиции «перевальной» точки при миграции в соседнюю тетраэдрическую пору (в центре треугольника, образованного тремя атомами металла в плоскости типа (111)). Перед расчетом энергии расчетного блока проводилась динамическая релаксация структуры с последующим охлаждением до 0 К.

При расчете энергии миграции водорода динамическим методом в расчетный блок вводился один атом водорода. Для различных значений температуры расчетного блока определялся коэффициент диффузии водорода в кристаллической решетке металла. При определении коэффициента диффузии компьютерные эксперименты имели продолжительность не менее 200 пс с шагом интегрирования по времени 1 фс. Коэффициент диффузии рассчитывался по формуле

$$D = \frac{1}{6tN}\sum_{i=1}^{N}\left[\left(x_{0i}-x_i\right)^2+\left(y_{0i}-y_i\right)^2+\left(z_{0i}-z_i\right)^2\right], \qquad (6)$$

где x_{0i}, y_{0i}, z_{0i} – координаты начального положения атома водорода; x_i, y_i, z_i – координаты атома водорода в момент времени t. Для исключения при расчете коэффициента диффузии по формуле (6) атомных смещений, обусловленных тепловыми колебаниями атомов, расчетный блок в конце компьютерного эксперимента охлаждался до температуры близкой к 0 К.

На рис. 2 приведены полученные в работе графики зависимостей $\ln D(T^{-1})$ при введении в расчетный блок одного атома водорода.

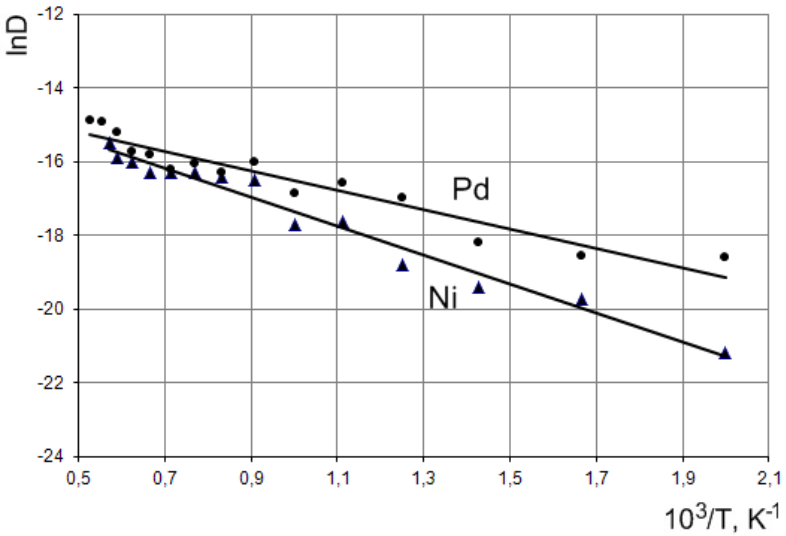


Рис. 2. Зависимости ln$D$ от T^{-1} для Pd и Ni при введении в расчетный блок одного атома водорода

Концентрация водорода в металле, естественно, может быть разной, но чтобы имелась возможность сравнить полученные данные с данными экспериментальных работ, при расчете предэкспоненциального множителя по формуле (5) концентрация водорода бралась как в работах [6, 18, 28, 29, 31, 32] – в среднем 0,5 % для Pd и Ni.

На рис. 3 приведены построенные в настоящей работе потенциалы взаимодействия Pd-H и Ni-H, а в табл. 1 – экспериментальные данные, по которым подбирались параметры потенциалов и соответствующие величины, полученные в молекулярно-динамической модели. Радиус действия потенциалов Морза, описывающих связи H-H, Pd-H и Ni-H, ограничивался пятью координационными сферами (т. е., примерно 6÷6,5 Å). В табл. 2 приведены параметры потенциалов.

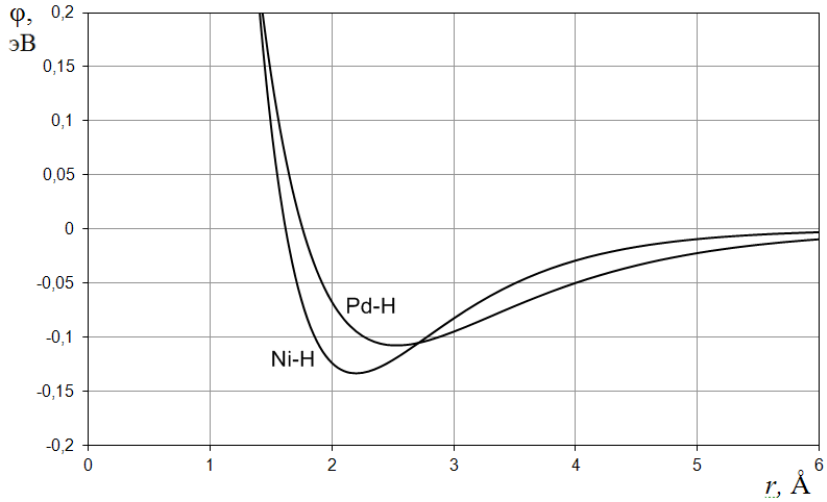


Рис. 3. Потенциалы взаимодействия Pd-H и Ni-H

Таблица 1

Значения энергии абсорбции водорода E_{ab}, энергии связи с вакансией E_{bv}, энергии активации диффузии E_m и предэкспоненциального множителя D_0 для систем Pd-H и Ni-H, полученные экспериментально и в молекулярно-динамической модели с использованием построенных потенциалов

		E_{ab}, эВ	E_{bv}, эВ	E_m, эВ		D_0, м^2/с
				статический метод	динамический метод	
Pd-H	эксперимент	-0,08÷-0,12 [1, 10, 24]	0,25÷0,27 [25 - 27]	0,22÷0,25 [6, 18, 28, 29]		$2\cdot10^{-7}$÷$8\cdot10^{-7}$ [6, 18, 28, 29]
	модель	-0,100	0,262	0,235	0,23	$9{,}2\cdot10^{-7}$
Ni-H	эксперимент	0,15÷0,17 [6, 8, 9]	0,32÷0,54 [8, 30]	0,33÷0,42 [29, 31, 32]		$5\cdot10^{-7}$÷$9\cdot10^{-7}$ [29, 31, 32]
	модель	0,160	0,401	0,375	0,34	$15{,}1\cdot10^{-7}$

Таблица 2

Параметры потенциалов Морза для связей H-H, Pd-H, Ni-H

	α, Å^{-1}	β	D, эВ
H-H	1,3	6,5	0,045
Pd-H	0,9	9,76	0,10737
Ni-H	1,2	14	0,1331

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Построенные потенциалы взаимодействий атомов водорода с атомами металла в палладии и никеле хорошо воспроизводят такие экспериментально получаемые характеристики как энергию абсорбции, энергию активации надбарьерной диффузии водорода в металле (при нормальных и высоких температурах), энергию связи с вакансией. Потенциалы взаимодействия атомов водорода друг с другом строились с учетом результатов первопринципных расчетов и потенциалов взаимодействия, полученных другими авторами.

Предложенные потенциалы предназначены для моделирования систем Pd-H и Ni-H методами молекулярной динамики и статики при использовании расчетных блоков, включающих большое число атомов и различные дефекты структуры.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Водород в металлах / под ред. Г. Алефельда и И. Фелькля М. : Мир, 1981. Т.2. 480 с.
2. Товбин Ю.К., Вотяков Е.В. Оценка влияния растворенного водорода на механические свойства палладия // ФТТ. 2000. Т.42, №7. С.1158-1160.
3. Гольцов В.А., Латышев В.В., Смирнов Л.И. Диффузия и растворимость водорода в металлах и упорядочивающихся сплавах // В кн. «Взаимодействие водорода с металлами» / под ред. А.П. Захарова. М. : Наука, 1987. С.105-143.
4. Гапонцев А.В., Кондратьев В.В. Диффузия водорода в неупорядоченных металлах и сплавах // УФН. 2003. Т.173, №10. С.1107-1129.
5. Андриевский Р.А. Водород в наноструктурах // Успехи физических наук. 2007. Т.177, №7. С.721-735.
6. Взаимодействие водорода с металлами / под. ред. А.П. Захарова. М. : Наука, 1987. 296 с.
7. Кашлев Ю.А. Три режима диффузионной миграции атомов водорода в металлах // Теоретическая и математическая физика. 2005. Т.145, №2. С.256-271.
8. Daw M.S., Baskes M.I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals // Phys. Rev. B. 1984. V.29, №12. P.6443-6453.
9. Daw M.S., Baskes M.I. Semiempirical, quantum mechanical calculation of hydrogen embrittlement in metals // Phys. Rev. Letters. 1983. V.50, №17. P.1285-1288.
10. Christensen O.B., Ditlevsen P.D., Jacobsen K.W. et al. H-H interactions in Pd // Phys. Rev. B. 1989. V.40, №3. P.1993-1996.
11. Баранов М.А., Дроздов А.Ю., Чудинов В.Г. и др. Атомные механизмы развития микротрещины в чистых ГЦК и ОЦК металлах и с примесью водорода // Журнал технической физики. 2000. Т.70, №4. С.46-51.
12. Katagiri M., Onodera H. Molecular dynamics simulation of hydrogen-induced amorphization: softening effect by incorporation of hydrogen // Materials Transactions. 1999. V.40, №11. P.1274-1280.

13. Kurokawa H., Nakayama T., Kobayashi Y. et al. Monte Carlo simulation of hydrogen absorption in palladium and palladium-silver alloys // Catalysis Today. 2003. V.82. P.233-240.
14. Zhou G., Zhou F., Zhao X. et al. Molecular dynamics simulation of hydrogen enhancing dislocation emission // Science in China. 1998. V.41, №2. P.176-181.
15. Liu S.J., Shi S.Q., Huang H. et al. Interatomic potentials and atomistic calculations of some metal hydride systems // Journal of Alloys and Compounds. 2002. V.330-332. P. 64-69.
16. Максимов Е.Г., Шилов Ю.И. Водород при высоких давлениях // Успехи физических наук. 1999. Т.169, №11. С.1223-1242.
17. Кулабухова Н.А., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. и др. Молекулярно-динамическое моделирование примеси водорода в ГЦК металлах // Известия АлтГУ. Сер. Математика и механика. Управление, вычислительная техника и информатика. Физика. 2011. Т.69, №1. С.160-165.
18. Спивак Л.В., Скрябина Н.Е., Кац М.Я. Водород и механическое последействие в металлах и сплавах. Пермь : Изд-во Перм. ун-та, 1993. 344 с.
19. Liu Y., Zhang Y., Zhou H. et al. Vacancy trapping mechanism for hydrogen bubble formation in metal // Phys. Rev. B. 2009. V.79. P.172103 (4).
20. Полетаев Г.М., Юрьев А.Б., Громов В.Е. и др. Атомные механизмы структурно-энергетических превращений вблизи границ зерен наклона в ГЦК металлах и интерметаллиде Ni3Al. Новокузнецк : Изд-во СибГИУ, 2008. 160 с.
21. Shalashilin D.V., Jackson B., Persson M. Eley-rideal and hot-atom dynamics of HD formation by H(D) incident from the gas phase on D(H)-covered Cu(111) // Faraday Discussions. 1998. V.110. P.287-300.
22. Cleri F., Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys // Physical Review B. 1993. V.48, №1. P.22-33.
23. Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Вклады различных механизмов самодиффузии в ГЦК-металлах в условиях равновесия // Физика твердого тела. 2010. Т.52, №6. С.1075-1082.
24. Lewis F.A. The Palladium–Hydrogen System // Platinum Metals Rev. 1982. V.26, №1. P.20-27.
25. Myers S.M., Picraux S.T., Stoltz R.E. Defect trapping of ion-implanted deuterium in Fe // J. Appl. Phys. 1979. V.50. P.5710-5719.
26. Еремеев С.В., Кульков С.С., Кулькова С.Е. Влияние примесей d-металлов на границах зерен на сорбцию водорода в палладии // Физическая мезомеханика. 2010. V.13, №6. С.81-87.
27. Flanagan T.B., Balasubramaniam R., Kirchheim R. Exploring lattice defects in palladium and its alloys using dissolved hydrogen. Part I: Hydrogen solubility and its segregation to dislocations and vacancies // Platinum Metals Review. 2001. V.45, №3. P.114-121.
28. Kamakoti P., Sholl D.S. Density Functional Theory Studies of Hydrogen Diffusion in CuPd Alloys // Fuel Chemistry Division Preprints. 2002. V.47, №2. P.818-819.
29. Лариков Л.Н., Исайчев В.И. Диффузия в металлах и сплавах. Киев : Наукова думка, 1987. 511 с.
30. Besenbacher F., Bottiger J., Myers S.M. Defect trapping of ion-implanted deuterium in nickel // J. Appl. Phys. 1982. V.53. P.3547-3551.
31. Tanaka K., Atsumi T., Yamada M. An internal friction peak due to hydrogen-dislocation interaction in nickel // Journal de physique. 1981. V.42, №10. P.139-144.
32. Сидоренко В.М., Сидорак И.И. Определение диффузионных характеристик граничных и объемных составляющих потока диффундирующего водорода в поликристаллическом металле // Физико-химическая механика материалов. 1973. Т.9, №1. С.52-57.

POTENTIALS OF INTERATOMIC INTERACTION IN SYSTEMS Pd-H AND Ni-H

Poletaev G.M., Kulabukhova N.A., Starostenkov M.D.

I.I. Polzunov Altai state technical university, Altai region, Barnaul, Russia

SUMMARY. Potentials of interatomic interaction *H-H, Pd-H, Ni-H* were constructed for the computer simulation of hydrogen impurity in Pd and Ni. The results of first-principle calculations of other authors were taking into account in construction of potential H-H. Potentials Pd-H and Ni-H were selected according to experimental data of energy of absorption, activation energy of under-barrier diffusion of hydrogen in metal, bond energy with vacancy.

KEYWORDS: potential of interatomic interaction, molecular dynamics, metal, hydrogen, energy of absorption, activation energy of diffusion.

Полетаев Геннадий Михайлович, доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры общей физики АГТУ, тел. (385-2)29-08-52, e-mail: gmpoletaev@mail.ru

Кулабухова Наталья Александровна, аспирант АГТУ, e-mail: natalya_domaeva@mail.ru

Старостенков Михаил Дмитриевич, доктор физико-математических наук, профессор, заслуженный деятель науки РФ, заведующий кафедрой общей физики АГТУ, e-mail: genphys@mail.ru