

Ab initio моделирование энергии растворения водорода в неупорядоченных ГЦК сплавах Ti-V

Мирзоев А.А.^{1,®} и Верховых А.В.¹

¹ Южно-Уральский государственный университет, пр. Ленина 76, Челябинск, 454080, Россия

® mirzoevaa@susu.ru

Сплавы Ti-V являются базовыми материалами для хранения водорода, но их характеристики, важные для практического применения, сильно зависят от состава. Поиск оптимального состава с заданными характеристиками требует глубокого понимания влияния состава на поведение атомов растворенного водорода, что требует проведения теоретических расчетов электронной структуры сплавов и их гидридов. В данной работе в рамках теории функционала плотности были рассчитаны энтальпии растворения водорода в тетраэдрических порах различного состава Ti_4-nV_n ($n=0,1,2,3,4$). Проводится сравнение с результатами других квантово-статистических подходов и имеющимися данными экспериментов. Вероятность нахождения атомов водорода в тетрапорах различного состава определялась с помощью функции Ферми-Дирака [1]. На основании этих данных получена зависимость средней энергии растворения водорода в гидриде бинарного сплава $Ti_{1-x}V_x$ от содержания ванадия. Показано, что наличие упорядочения в сплавах с гранецентрированной кубической решеткой с параметром ближнего порядка Каули, равным 0.25 очень слабо влияет на данную зависимость. Этот результат резко отличается от случая ОЦК гидридов Ti-V [2]. Работа поддержана грантом РНФ (проект No. 25-22-20062).

[1] OO Bavrina M 2018 *International Journal of Hydrogen Energy* **43**(36) 17338–17345

[2] Brouwer R C and Griessen R 1989 *Phys.Rev.B* **40**(3) 1481–1494