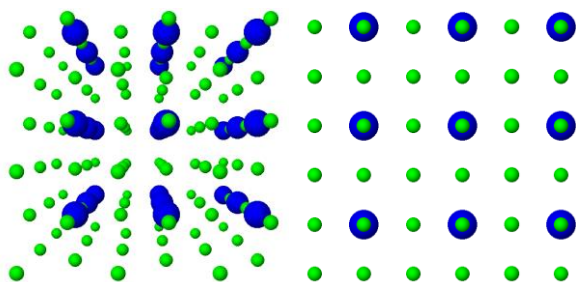


Исследование влияние водорода на механические свойства ГЦК металлов

Получение модуля объемной упругости для PdH1 используя DFT



PdH_{0.25}
 Количество атомов: Pd=108
 H=27

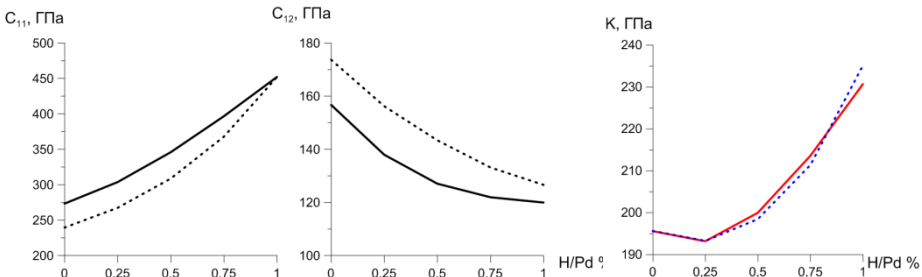
Полученный потенциал взаимодействия Pd-H

Параметры потенциала подбирались путем последовательного приближения.

После изменения каждого параметра изменялась постоянная решетки для нахождения равновесного состояния.

$$a = 0,613 \frac{1}{\text{Å}}; \beta = 5,20 \text{ и } D = 3,20e^{-19} \text{ Дж}$$

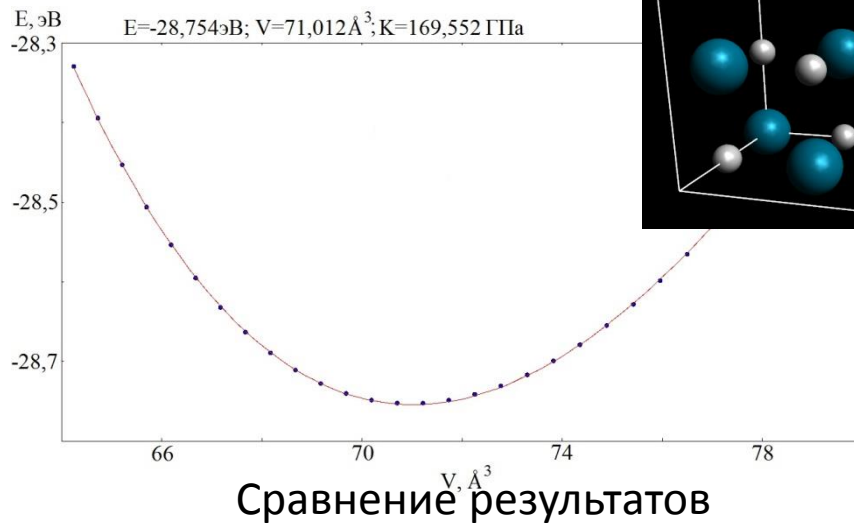
Анализ полученного потенциала взаимодействия Pd-H



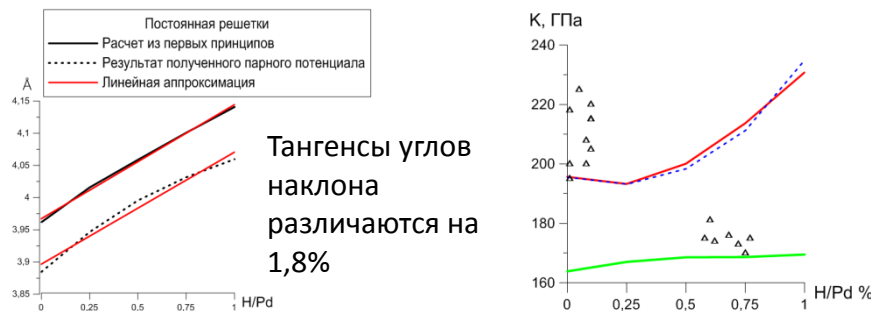
Сравнение данных работы [2] (штриховая линия) и полученного нами результата с помощью найденных потенциалов в данной работе (сплошная линия)

Выводы

- Определены параметры потенциала Морзе, описывающих механические характеристики бинарных растворов PdH_x. Выявлена разница результатов полученных программными пакетами GPAW и VASP, свидетельствующая о необходимости более подробного исследования особенностей электронной подсистемы.
- Отличие результатов моделирования от экспериментальных данных, для модуля объёмной упругости составляет всего ~15%. Вероятно это обусловлено микроструктурой экспериментальных образцов



Сравнение результатов



Тангенсы углов наклона различаются на 1,8%

Сравнение результатов, модуля объемной упругости, полученных в данной работе, используя потенциал Морзе (синяя штриховая линия), в работе [1] (красная сплошная), используя расчеты из первых принципов (зеленая сплошная) и с экспериментальными данными из работы [2] (треугольники)