ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ И КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ АТОМОВ ВОДОРОДА В ОЦК-ЖЕЛЕЗЕ

А.Б. Сивак, П.А. Сивак

НИИ «Курчатовский институт», Москва, Россия

Модифицирован многочастичный потенциал для водорода в объёмно-центрированном кубическом железе (ОЦК-железе), разработанный А. Рамасубраманиамом и др., для использования в матрице ОЦК-железа, взаимодействия в которой описываются многочастичным потенциалом, разработанным Л. Малерба и др. Рассчитаны энергетические и кристаллографические характеристики различных конфигураций межузельного водорода и его комплексов с собственными точечными дефектами (вакансия, собственный межузельный атом) и краевой дислокацией с вектором Бюргерса $\langle 100 \rangle$ методом молекулярной статистики с использованием предложенного модифицированного потенциала межатомного взаимодействия. Полученные результаты согласуются с характеристиками водорода в железе, известными из эксперимента и расчётов в рамках теории функционала электронной плотности.

Ключевые слова: ОЦК-кристалл железа, водород, потенциалы межатомного взаимодействия, молекулярная статика, собственные точечные дефекты, кристаллографические и энергетические характеристики, краевая дислокация.

ENERGETIC AND CRYSTALLOGRAPHIC CHARACTERISTICS OF HYDROGEN ATOMS IN BCC IRON

A.B. Sivak, P.A. Sivak

NRC "Kurchatov Institute", Moscow, Russia

An interaction potential for hydrogen in bcc iron developed by A. Ramasubramaniam et al. was modified for use in bcc iron matrix based on the embedded atom method potential developed by L. Malerba et al. The energetic and crystallographic characteristics of different configurations of the interstitial hydrogen and its complexes with self-point defects (vacancy, self-interstitial atom) and an edge dislocation with Burgers vector $\langle 100 \rangle$ were calculated by molecular statics using the introduced modified interatomic interaction potential. These results are consistent with experimental data and theoretical calculations within density functional theory of hydrogen characteristics in bcc iron.

Key words: bcc iron crystal, hydrogen, interatomic interaction potentials, molecular statics, self-point defects, crystallographic and energetic characteristics, edge dislocation.

ВВЕДЕНИЕ

Накопление изотопов водорода в конструкционных материалах ядерных и термоядерных реакторов может оказывать значительное влияние на их физико-механические свойства [1], ограничивая температурное окно и временной ресурс эксплуатации изделий из них. Микроскопические механизмы влияния водорода на макросвойства материалов ещё недостаточно хорошо изучены. Экспериментальное определение таких механизмов затруднено вследствие малости пространственных и временных масштабов, на которых необходимо проводить исследования. В связи с этим дополнительное использование теоретического и моделирующего подходов может существенно помочь эксперименту в определении механизмов влияния водорода на свойства материала. Определяющую роль в вычислении методами компьютерного моделирования характеристик дефектов металлических кристаллических решёток играет потенциал межатомного взаимодействия. Поэтому особое внимание должно быть обращено на его физическую обоснованность и адекватность описания им известных из эксперимента или теоретических расчётов свойств кристалла и его дефектов.

Наиболее полно отражающими известные экспериментальные и полученные из расчётов методами теории функционала электронной плотности (ТФЭП) свойства водорода в ОЦК-железе являются полученные в [2] многочастичные потенциалы межатомного взаимодействия Fe—H. В качестве матричных потенциалов, описывающих взаимодействие Fe—Fe, в [2] использовались потенциалы из [3] и [4]. Однако после опубликования работы [2] появился новый матричный потенциал [5], лучше описывающий свойства собственных точечных дефектов (СТД) кристалла относительно потенциалов [3, 4].

В настоящей работе:

- модифицирован разработанный в [2] потенциал межатомного взаимодействия Fe—H таким образом, чтобы компьютерные расчёты с использованием матричного потенциала Fe—Fe [5] воспроизводили известные из экспериментов и ТФЭП-расчётов свойства атомов H в ОЦК-железе;
- с помощью модифицированного потенциала методом молекулярной статистики рассчитаны энергетические и кристаллографические характеристики (энергия растворения, энергия миграции, энергия связи, релаксационный объём, дипольный тензор) межузельного атома H и его комплексов с СТД (вакансия, собственный межузельный атом СМА) в ОЦК-кристалле Fe, определены механизмы их миграции;
- рассчитана энергия связи атома H с краевой дислокацией с вектором Бюргерса $\langle 100 \rangle$.

КОМПЬЮТЕРНАЯ МОДЕЛЬ

Модельный кристаллит и обозначения дефектов. Модельный кристаллит представлял собой куб с жёсткими граничными условиями. Тестовые расчёты показали, что для высокой точности расчёта (погрешность менее 0,1%) характеристик точечных дефектов кристаллической решётки (СТД, межузельный атом H, их комплексы) достаточно использовать модельный кристаллит, содержащий ~6000 подвижных атомов. Поэтому все дальнейшие расчёты проводились в кристаллите, содержащем 6119 подвижных атомов до создания в нём точечного дефекта. Минимизация потенциальной энергии кристаллита после создания дефекта проводилась методом градиентного спуска до величины максимальной действующей на атомы в кристаллите силы 10^{-6} эВ/нм. В работе изучено большое количество разнообразных атомных конфигураций, для удобства последующего изложения обозначения и описание этих конфигураций сведены в табл. 1. В работе использовалась стандартная кристаллографическая система координат (КСК).

Т а б л и ц а 1. Обозначения рассмотренных дефектов кристаллической решётки

Обозначение	Конфигурация
Собственные точечные дефекты	
I_{110}	Гантель $\langle 110 \rangle$
$I_{110,CT}$	Гантель $\langle 110 \rangle$ в седловой позиции
I_{111}	Гантель $\langle 111 \rangle$
I_C	Краудион
I_T	СМА в тетрапоре
I_O	СМА в октапоре
I_{100}	Гантель $\langle 100 \rangle$
V	Вакансия
V_{CT}	Седловая конфигурация вакансии
$V_{2,1}$	Две вакансии на расстоянии 1-х ближайших соседей ОЦК решётки
$V_{2,2}$	Две вакансии на расстоянии 2-х ближайших соседей ОЦК решётки
Атом водорода (H) в межузельных позициях	
H_T	Атом H в тетрапоре
$H_{T,CT}$	Седловая позиция атома H при миграции из одной тетрапоры в соседнюю
H_O	Атом H в октапоре
H_C	Атом H в краудионной позиции
Комплекс «вакансия—атом H»	
VH_δ	Атом H смещён из позиции замещения в направлении ближайшей октапоры и находится на расстоянии δ от неё
VH_0	Атом H в позиции замещения
$VH_{Tx,y,z}$	Вакансия находится в начале координат, атом H — в тетрапоре с координатами x, y, z
$VH_{Ox,y,z}$	Вакансия находится в начале координат, атом H — в октапоре с координатами x, y, z
$VH_{T\infty}$	Атом H в тетрапоре на бесконечном расстоянии от вакансии
$VH_{O\infty}$	Атом H в октапоре на бесконечном расстоянии от вакансии
Комплекс «СМА—атом H»	
$IH_{Tx,y,z}$	СМА находится в начале координат, атом H — в тетрапоре с координатами x, y, z
$IH_{Ox,y,z}$	СМА находится в начале координат, атом H — в октапоре с координатами x, y, z

Примечание: координаты x, y, z указываются в четвертях параметра решётки.

Потенциалы межатомных взаимодействий. Наиболее полно отражающими известные экспериментальные и полученные из ТФЭП-расчётов свойства водорода в ОЦК-железе являются многочастичные потенциалы [2], далее обозначаемые здесь как R09A и R09B (в [2] эти потенциалы обозначаются как A и B соответственно). В качестве матричных потенциалов, описывающих взаимодействие Fe—Fe, в [2] использовались потенциалы M03 (потенциал 2 из [3]) и A04 [4] для потенциалов R09A и R09B соответственно. Полная энергия системы N атомов представляется в работе [2]:

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \phi_{ij}(r_{ij}) + \sum_{j=1}^N F_j \left[\sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^N \rho_{ij}(r_{ij}) \right], \quad (1)$$

где r_{ij} — расстояние между атомами i и j ; ϕ_{ij} — парное взаимодействие между атомами i и j ; ρ_{ij} — электронная плотность, создаваемая атомом i на атоме j ; F_j — функция погружения для атома j . При данной многочастичной форме необходимо задать девять функций: ϕ_{FeFe} , ϕ_{FeH} , ϕ_{HH} , ρ_{FeFe} , ρ_{FeH} , ρ_{HFe} , ρ_{HH} , F_{Fe} и F_{H} . Три из них определяются матричным потенциалом: ϕ_{FeFe} , ρ_{FeFe} , F_{Fe} .

Матричные потенциалы M03 и A04 недостаточно хорошо описывают свойства СТД и поверхностные свойства (относительно экспериментальных данных и результатов ТФЭП-расчётов) в ОЦК-железе [5]. Поэтому разработан улучшенный потенциал M07 [5]. Характеристики СТД, рассчитанные с использованием потенциалов M03, A04 и M07, приведены в табл. 2. Потенциал межатомных взаимодействий для системы Fe—H с матричным потенциалом M07 ранее разработан не был.

Т а б л и ц а 2. Энергия образования E^F (эВ), релаксационный объём V^R (в атомных объёмах), дипольный тензор P_{ij} (эВ) в кристаллографической системе координат собственных точечных дефектов в ОЦК-кристалле железа

СТД	E^F	V^R	P_{11}	P_{22}	P_{33}	P_{23}	P_{13}	P_{12}
Потенциал M03								
I_{110}	3,192; 3,20 ¹	1,049	12,93	12,93	14,81	0	0	2,59
$I_{110,\text{CT}}$	3,443	1,058	14,12	12,77	14,12	2,59	1,53	2,59
I_{111}	3,517; 3,52 ¹	0,896	11,58	11,58	11,58	5,37	5,37	5,37
I_C	3,516	0,926	11,97	11,97	11,97	5,27	5,27	5,27
I_T^2	3,629	0,973	10,84	13,44	13,44	0	0	0
I_O	3,660	0,944	16,74	9,93	9,93	0	0	0
I_{100}^2	3,765; 3,77 ¹	0,927	14,95	10,49	10,49	0	0	0
V	1,713; 1,72 ¹	-0,247	-3,19	-3,19	-3,19	0	0	0
V_{CT}	2,246; 2,24 ¹	-0,343	-4,44	-4,44	-4,44	-1,55	-1,55	-1,55
$V_{2,1}$	3,355	-0,415	-5,36	-5,36	-5,36	0,79	0,79	0,79
$V_{2,2}$	3,208	-0,527	-7,43	-6,50	-6,50	0	0	0
Потенциал A04								
I_{110}	3,529; 3,59 ³	1,236; 1,247 ³	14,92	14,92	18,06	0	0	3,70
$I_{110,\text{CT}}$	3,834	1,220	16,19	14,89	16,19	3,07	0,93	3,07
I_{111}^2	4,006	0,988	12,76	12,76	12,76	6,33	6,33	6,33
I_C	3,999	1,015	13,11	13,11	13,11	6,44	6,44	6,44
I_T^2	4,152	1,052	14,53	14,53	11,70	0	0	0
I_O	4,171; 4,22 ³	1,013; 1,021 ³	18,37	10,44	10,44	0	0	0
$I_{100}^{2;4}$	4,348; 4,32 ³	1,078	17,24	12,26	12,26	0	0	0
V	1,721; 1,71 ³	-0,216; -0,223 ³	-2,79	-2,79	-2,79	0	0	0
V_{CT}	2,356; 2,34 ³	-0,341	-4,40	-4,40	-4,40	-1,71	-1,71	-1,71
$V_{2,1}$	3,303; 3,285 ³	-0,351; -0,353 ³	-4,53	-4,53	-4,53	0,6	0,6	0,6
$V_{2,2}$	3,203; 3,18 ³	-0,486; -0,489 ³	-6,61	-6,11	-6,11	0	0	0
Потенциал M07								
I_{110}	3,696; 3,69 ⁵	1,481; 1,50 ⁵	17,30	17,30	22,79	0	0	6,21
$I_{110,\text{CT}}$	3,969; 3,98 ⁵	1,283	17,25	15,21	17,25	4,66	-0,44	4,66
I_T^2	4,312; 4,31 ⁵	1,269	16,83	16,83	15,52	0	0	0
I_C	4,358	1,227	15,85	15,85	15,85	9,60	9,60	9,60
I_{111}^2	4,361; 4,36 ⁵	1,226; 1,29 ⁵	15,83	15,83	15,83	9,53	9,53	9,53
I_{100}^2	4,760; 4,76 ⁵	1,096	21,33	10,57	10,57	0	0	0
I_O^2	4,906; 4,90 ⁵	1,119	20,64	11,36	11,36	0	0	0
V	2,104; 2,10 ⁵	-0,096; -0,10 ⁵	-1,24	-1,24	-1,24	0	0	0
V_{CT}	2,787; 2,78 ⁵	-0,106	-1,36	-1,36	-1,36	-1,67	-1,67	-1,67
$V_{2,1}$	4,068; 4,07 ⁵	-0,192	-2,47	-2,47	-2,47	0,61	0,61	0,61
$V_{2,2}$	3,875; 3,88 ⁵	-0,256	-4,63	-2,65	-2,65	0	0	0

¹ [3].

² Конфигурация СМА нестабильна и переориентируется в I_{110} , если не ограничивать перемещения атомов при релаксации.

³ [4].

⁴ По данным [4] эта конфигурация СМА нестабильна и переориентируется в I_O , если не ограничивать перемещения атомов при релаксации.

⁵ [5].

Тестовые расчёты характеристик межузельного атома Н и его комплекса с вакансией с помощью наборов потенциалов M03R09A, A04R09B, M07R09A и M07R09B показали (табл. 3), что использование потенциалов R09A и R09B с матричным потенциалом M07 приводит к значительному отличию характеристик атома Н в железе от рассчитанных с использованием набора потенциалов M03R09A и A04R09B: набор M07R09A сильно занижает энергию растворения атома Н и несколько уменьшает энергию связи атома Н с вакансией; набор M07R09B несколько занижает энергию растворения атома Н и сильно занижает энергию миграции межузельного атома Н. Для исправления указанных недостатков в данной работе проведена модификация параметров потенциала R09A — изменены параметры функций ϕ_{FeH} и F_{H} .

Т а б л и ц а 3. Сравнение результатов расчёта с использованием межатомных потенциалов с результатами ТФЭП-расчётов и экспериментальными данными для энергии растворения E^D (эВ) и энергии миграции E^M (эВ) межузельного атома водорода в тетрапоре и энергии связи E_{HV} (эВ) атома водорода с вакансией (атом Н смещён из позиции замещения в направлении ближайшей октапеды и находится на расстоянии δ (Å) от неё) в ОЦК-железе

Характеристика	M03R09A	A04R09B	M07R09A	M07R09B	M07R13	ТФЭП	Эксперимент
E^D	0,281; 0,287 ¹	0,292; 0,297 ¹	0,112	0,228	0,302	0,330 ¹	0,30 ³
E^M	0,039; 0,039 ¹	0,040; 0,040 ¹	0,042	0,016	0,037	0,045 ¹	0,035—0,142 ⁴ ; 0,042 ⁵
E_{HV}	0,549; 0,556 ¹	0,603; 0,609 ¹	0,508	0,599	0,536	0,690 ¹ ; 0,559 ²	0,63 ⁶
δ	0,327; 0,33 ¹	0,295; 0,30 ¹	0,233	0,248	0,239	0,23 ¹	0,40 ⁶

¹ [2].

² [7].

³ [8].

⁴ [9].

⁵ [10].

⁶ [11].

Парная часть взаимодействия Fe—Н описывается функцией

$$\phi_{\text{FeH}} = \begin{cases} Z_{\text{Fe}} Z_{\text{H}} q_e^2 \Phi(r/r_s) / r & \text{при } r < r_1, \\ B_0 + B_1 r + B_2 r^2 + B_3 r^3 + B_4 r^4 + B_5 r^5 & \text{при } r_1 \leq r \leq r_2, \\ \sum_{i=1}^{N^{\phi}} a_i^{\phi} (r_i^{\phi} - r)^3 H(r_i^{\phi} - r) & \text{при } r > r_2, \end{cases} \quad (2)$$

где Z_{Fe} и Z_{H} — атомные номера Fe и Н соответственно; q_e — заряд электрона, H — функция Хевисайда; $r_s = 0,88534 a_{\text{B}} / (Z_{\text{Fe}}^{0,23} + Z_{\text{H}}^{0,23})$ — радиус экранирования; a_{B} — боровский радиус; $\Phi(x)$ — функция экранирования [6]:

$$\Phi(x) = 0,18175e^{-3,19980x} + 0,50986e^{-0,94229x} + 0,28022e^{-0,40290x} + 0,028171e^{-0,20162x}. \quad (3)$$

Функция погружения для атома Н имеет вид

$$F_{\text{H}}(\rho) = \sum_{i=1}^{N^F} a_i^F \rho^i \quad (4)$$

Изменённые параметры функций ϕ_{FeH} и F_{H} приведены в табл. 4. Все остальные параметры не изменялись относительно оригинального потенциала R09A и приведены в [2]. Модифицированный в этой работе потенциал Fe—Н далее будет обозначаться как R13.

Т а б л и ц а 4. Параметры межатомного потенциала R13, отличающиеся от межатомного потенциала R09A (потенциал А из [2])

i	a_i^{ϕ}	B_i	a_i^F
0	—	1245,3711211846762	—
1	14,0786231962990000	−6024,788561243513	−0,0575443559609953
2	−4,4526783747155500	12356,515365292183	0,0022626007305399
3	5,4977131750296800	−12973,06021004897	−0,0000311060777747
4	−1,0654295754678300	6823,329193888271	0,0000013626490763
5	−0,3404475295724350	−1423,0994459777085	−0,0000000251170654
6	−0,0064858816935181	—	0,0000000001468848
7	−0,0333756400647247	—	—

Примечание: обозначения и размерности как в [2].

Результаты расчётов характеристик межузельного атома Н и его комплекса с вакансией для набора M07R13 представлены в табл. 3. Сравнение данных табл. 3 показывает, что набор потенциалов M07R13 с достаточной точностью описывает характеристики межузельного атома Н и его комплекса с вакансией

относительно экспериментальных данных и результатов ТФЭП-расчётов. Далее расчёты будут проводиться для двух наборов потенциалов — A04R09B и M07R13.

РЕЗУЛЬТАТЫ

Межузельный атом водорода. Рассчитанные энергетические и кристаллографические характеристики межузельного атома Н с использованием наборов межатомных потенциалов A04R09B и M07R13 приведены в табл. 5. Энергия растворения определялась как

$$E^D = E_{\text{bulk} + \text{H}} - E_{\text{bulk}} - 0,5E_{\text{H}_2}, \quad (5)$$

где члены энергии с правой стороны представляют поочерёдно металл с поглощённым атомом Н в соответствующей позиции, металл в целом и водород в газовой фазе. Для используемого потенциала взаимодействия Н—Н $E_{\text{H}_2} = -4,74$ эВ [2].

Сравнение полученных результатов показывает, что наборы потенциалов A04R09B и M07R13 дают похожий набор свойств межузельного атома Н (табл. 5).

Т а б л и ц а 5. Энергия растворения E^D (эВ), релаксационный объём V^R (в атомных объёмах), дипольный тензор P_{ij} (эВ) в кристаллографической системе координат межузельного атома водорода в ОЦК-железе

Атом Н	E^D	V^R	P_{11}	P_{22}	P_{33}	P_{23}	P_{13}	P_{12}
Набор потенциалов A04R09B								
H _T	0,292; 0,297 ¹	0,325; 0,329 ²	4,44; 4,55 ²	4,44; 4,55 ²	3,69; 3,65 ²	0	0	0
H _{T,SP}	0,332; 0,337 ¹	0,312; 0,308 ²	3,31	3,31	5,46	0	0	0,64
H _O	0,341	0,309	5,90	3,04	3,04	0	0	0
H _C ³	0,975	0,314	4,05	4,05	4,05	2,47	2,47	2,47
Набор потенциалов M07R13								
H _T	0,302	0,311	4,26	4,26	3,54	0	0	0
H _{T,SP}	0,339	0,297	3,19	3,19	5,12	0	0	0,23
H _O	0,346	0,300	5,42	3,10	3,10	0	0	0
H _C ³	1,063	0,353	4,56	4,56	4,56	2,52	2,52	2,52

¹ [2].

² Значение получено в данной работе на основе зависимостей величины E^D от деформаций решётки, полученных в [2].

³ Конфигурация нестабильна и переориентируется в конфигурацию H_T, если не ограничивать перемещения атомов при релаксации кристаллита.

Наиболее энергетически выгодной конфигурацией межузельного атома Н является H_T. Высота энергетического барьера для миграции атома Н по конфигурациям H_T составляет ~0,04 эВ. Межузельный атом Н в седловой конфигурации для процесса миграции в соседнюю тетрапору находится в позиции с координатами (в половинах постоянных решётки) (0,824; 0,824; 0) и (0,855; 0,855; 0) для наборов потенциалов A04R09B и M07R13 соответственно.

Конфигурация H_O является метастабильной с энергией растворения на ~0,05 эВ выше, чем для стабильной конфигурации H_T. Барьер для перехода атома Н из H_{O200} в H_{T201} практически отсутствует: 6·10⁻⁵ эВ и 10⁻⁵ эВ для наборов потенциалов A04R09B и M07R13 соответственно, координаты седловой конфигурации — (1; 0; 0,05) и (1; 0; 0,03) соответственно.

Конфигурация H_C является нестабильной, её энергия растворения на ~0,7—0,8 эВ больше, чем у конфигурации H_T.

Дипольный тензор конфигурации H_T обладает слабой анизотропией, $P_{11}/P_{33} = 1,20$, в то время как аналогичное отношение для H_O составляет 1,94 и 1,75 для наборов потенциалов A04R09B и M07R13 соответственно. Столь заметно различающиеся дипольные тензоры конфигураций H_T и H_O могут привести к тому, что в сильных внешних полях деформаций устойчивость двух конфигураций относительно друг друга может измениться, тем более что различие в их энергиях растворения в отсутствие внешних полей деформаций невелико.

Комплексы «вакансия—атом водорода». Для комплексов «вакансия—атом водорода» (VH-комплексы) энергия связи рассчитывалась как

$$E^B(\text{HV}) = E^D(\text{H}_T) + E^F(\text{V}) - E^D(\text{HV}), \quad (6)$$

где $E^D(\text{H}_T)$ — энергия растворения атома Н в тетрапоре (см. табл. 5); $E^F(\text{V})$ — энергия образования вакансии (см. табл. 2); $E^D(\text{HV})$ — энергия растворения атома Н вблизи вакансии (табл. 6, 7).

Таблица 6. Энергия связи E^B (эВ), релаксационный объём V^R (в атомных объёмах), дипольный тензор P_{ij} (эВ) в кристаллографической системе координат различных конфигураций «вакансия—атом водорода» в ОЦК-железе

VH-комплекс	E^B	V^R	P_{11}	P_{22}	P_{33}	P_{23}	P_{13}	P_{12}
Набор потенциалов A04R09B								
VH _δ	0,603	−0,152	−1,99	−1,99	−1,92	0	0	0
VH _O ¹	0,298	−0,336	−4,34	−4,34	−4,34	0	0	0
VH _{T302}	0,087	0,136	1,11	2,42	1,75	0	−0,20	0
VH _{T142}	0,039	0,100	0,88	1,62	1,39	−0,20	−0,38	−0,48
VH _{T342}	0,067	0,068	0,36	1,33	0,92	−0,25	−0,35	0,15
VH _{T502}	−0,017	0,120	0,84	1,88	1,93	0	−0,27	0
VH _{T106}	−0,026	0,123	1,16	2,05	1,54	0	−0,24	0
VH _{T306}	0,000	0,108	0,89	1,68	1,60	0	−0,03	0
VH _{T542}	−0,001	0,112	0,89	1,71	1,75	−0,02	0,09	0,12
VH _{T702}	−0,002	0,113	0,96	1,72	1,71	0	−0,05	0
VH _{T146}	0,002	0,105	0,91	1,59	1,58	−0,05	0,05	0,03
VH _{T364}	0,001	0,106	0,88	1,62	1,59	0	−0,18	−0,06
VH _{T506}	0,005	0,102	0,79	1,63	1,55	0	0	0
VH _{T∞}	0	0,109	0,90	1,65	1,65	0	0	0
Набор потенциалов M07R13								
VH _δ	0,536	−0,005	−0,11	−0,11	0,04	0	0	0
VH _O ¹	0,183	−0,178	−2,29	−2,29	−2,29	0	0	0
VH _{T302}	0,119	0,236	2,54	3,39	3,20	0	−0,37	0
VH _{T142}	0,063	0,221	2,38	3,24	2,95	−0,24	−0,23	−0,26
VH _{T342}	0,064	0,206	2,16	3,27	2,53	−0,10	−0,29	0,04
VH _{T502}	−0,011	0,224	2,23	3,09	3,38	0	−0,35	0
VH _{T106}	−0,035	0,215	2,36	3,47	2,49	0	−0,13	0
VH _{T306}	−0,003	0,215	2,30	3,15	2,87	0	−0,12	0
VH _{T542}	−0,001	0,222	2,34	3,17	3,09	−0,03	−0,04	0,10
VH _{T702}	0,000	0,216	2,20	3,15	3,02	0	−0,10	0
VH _{T146}	−0,003	0,213	2,32	3,04	2,88	−0,07	−0,03	−0,01
VH _{T364}	0,003	0,212	2,27	3,00	2,95	0	−0,08	−0,10
VH _{T506}	0,000	0,214	2,28	3,06	2,94	0	−0,07	0
VH _{T∞}	0	0,215	2,30	3,02	3,02	0	0	0

¹ Конфигурация нестабильна и переориентируется в конфигурацию VH_δ, если не ограничивать перемещения атомов при релаксации кристаллита.

 Таблица 7. Энергия связи E^B (эВ), релаксационный объём V^R (в атомных объёмах), дипольный тензор P_{ij} (эВ) в кристаллографической системе координат различных конфигураций «вакансия—атом водорода» в ОЦК-железе

VH-комплекс	E^B	V^R	P_{11}	P_{22}	P_{33}	P_{23}	P_{13}	P_{12}
Набор потенциалов A04R09B								
VH _{O200} → VH _δ	—	—	—	—	—	—	—	—
VH _{O202} → VH _δ	—	—	—	—	—	—	—	—
VH _{O402} → VH _{T302}	—	—	—	—	—	—	—	—
VH _{O422}	0,069	0,042	1,93	−0,15	−0,15	−0,44	−0,14	−0,14
VH _{O442}	0,019	0,072	0,40	0,40	1,98	−0,29	−0,29	1,02
VH _{O600}	−0,086	0,102	2,65	0,65	0,65	0	0	0
VH _{O602} → VH _{T603}	—	—	—	—	—	—	—	—
VH _{O640} → VH _{T650}	—	—	—	—	—	—	—	—
VH _{O642} → VH _{T641}	—	—	—	—	—	—	—	—
VH _{O644}	−0,013	0,074	2,38	0,25	0,25	0,33	−0,07	−0,07
VH _{O∞}	−0,049	0,093	3,11	0,25	0,25	0	0	0
Набор потенциалов M07R13								
VH _{O200} → VH _δ	—	—	—	—	—	—	—	—
VH _{O202} → VH _δ	—	—	—	—	—	—	—	—
VH _{O402} → VH _{T302}	—	—	—	—	—	—	—	—
VH _{O422}	0,060	0,188	3,75	1,77	1,77	−0,28	−0,08	−0,08
VH _{O442}	0,000	0,217	2,27	2,27	3,87	−0,16	−0,16	0,53
VH _{O600}	−0,097	0,153	2,60	1,65	1,65	0	0	0
VH _{O602} → VH _{T702}	—	—	—	—	—	—	—	—
VH _{O640} → VH _{T650}	—	—	—	—	—	—	—	—
VH _{O642} → VH _{T541}	—	—	—	—	—	—	—	—
VH _{O644}	−0,012	0,190	3,75	1,81	1,81	−0,03	−0,10	−0,10
VH _{O∞}	−0,044	0,204	4,18	1,86	1,86	0	0	0

Примечание: стрелка указывает, в какую конфигурацию переходит исходный VH-комплекс во время релаксации.

Атом Н в положении замещения (VH_O) неустойчив и в процессе релаксации смещается в направлении ближайшей октопоры, останавливаясь на расстоянии δ от октопоры (см. табл. 3). Образующаяся конфигурация VH_8 обладает наибольшей энергией связи среди всех рассмотренных VH -комплексов (см. табл. 6, 7). Барьер для скачка атома Н из вакансии в ближайшую устойчивую конфигурацию HT_{302} и обратно представлен на рис. 1. Наблюдается качественное согласие между результатами для набора потенциалов A04R09B и M07R13. Высота барьера для скачка атома Н из вакансии ниже для M07R13 (0,467 эВ), чем для A04R09B (0,541 эВ) и ТФЭП-расчётов (0,650 эВ [2]). Однако так как эффективный коэффициент диффузии атома Н определяется только энергией связи с ловушкой, это расхождение мало повлияет на кинетические расчёты. Барьер для перескока атома Н из одного связанного с вакансией положения VH_8 в кристаллографически эквивалентное соседнее положение для M07R13 (A04R09B) равен 0,066 эВ (0,062 эВ), что заметно меньше результата ТФЭП-расчёта (0,230 эВ [2]).

Рис. 1. Энергетический барьер для миграции атома водорода из связанного с вакансией комплекса (VH_8) в позицию тетрапоры, находящейся в объёме кристалла (VH_{T302}): чёрным цветом представлены данные для набора потенциалов M07R13; тёмно-синим — A04R09B

подраздел «Межузельный атом водорода»). Энергия взаимодействия вакансии с конфигурациями H_O превышает 0,03 эВ на расстоянии $\sim 2,1$ параметра решётки. Часть конфигураций H_O становятся неустойчивыми в поле деформаций вакансии и в процессе релаксации перестраиваются в конфигурации H_T . Другие, наоборот, уменьшают своё различие в энергиях растворения с конфигурациями H_T . Наибольшей энергией связи обладает конфигурация VH_{O422} , её энергия связи практически совпадает или превосходит по величине (в зависимости от используемого набора потенциалов) энергию связи близлежащей конфигурации VH_{T342} .

Комплексы «СМА—атом водорода». Для комплексов «СМА—атом водорода» (ИН-комплексы) энергия связи рассчитывалась как

$$E^B(ИН) = E^D(H_T) + E^F(I_{110}) - E^D(ИН), \quad (7)$$

где $E^F(I_{110})$ — энергия образования гантели $\langle 110 \rangle$ (см. табл. 2); $E^D(ИН)$ — энергия растворения атома водорода вблизи СМА (табл. 8). Во всех расчётах конфигурация СМА I_{110} ориентирована вдоль кристаллографического направления $[110]$.

Рассчитанные характеристики VH -комплексов, в которых атом Н находится в различных тетраэдрических позициях относительно вакансии, представлены в табл. 6. Из приведённых результатов видно, что энергия взаимодействия вакансии с атомом Н в тетрапорах не превышает 0,01 эВ, когда атом Н находится на расстоянии более 1,6 параметра решётки от вакансии. Комплексы VH_{T502} и VH_{T106} обладают заметной отрицательной энергией связи, однако они не могут препятствовать приближению атома Н к вакансии, так как он может приблизиться к вакансии через другие конфигурации, например, совершив скачок от VH_{T542} к VH_{T432} .

Рассчитанные характеристики VH -комплексов, в которых атом Н находится в различных октаэдрических позициях относительно вакансии, представлены в табл. 7. Видно, что конфигурации H_O взаимодействуют заметно сильнее с вакансией, чем конфигурации H_T , что обусловливается ярко выраженной анизотропией дипольного тензора конфигурации H_O (см.

Таблица 8. Энергия связи E^B (эВ), релаксационный объём V^R (в атомных объёмах), дипольный тензор P_{ij} (эВ) в кристаллографической системе координат различных конфигураций «СМА—атом водорода» в ОЦК-железе

ИИ-комплекс	E^B	V^R	P_{11}	P_{22}	P_{33}	P_{23}	P_{13}	P_{12}
1	2	3	4	5	6	7	8	9
Набор потенциалов A04R09B								
ИИ _{T302}	0,158	1,494	18,03	18,59	21,26	0,54	−0,65	3,99
ИИ _{O002}	0,118	1,510	17,60	17,60	23,29	0	0	3,06
Набор потенциалов M07R13								
ИИ _{T102} → ИИ _{O002}	—	—	—	—	—	—	—	—
ИИ _{T201} → ИИ _{T302}	—	—	—	—	—	—	—	—
ИИ _{T210} → ИИ _{T320}	—	—	—	—	—	—	—	—
ИИ _{T2-10}	0,049	1,701	19,42	20,36	26,10	0	0	5,79
ИИ _{T203} → ИИ _{T302}	—	—	—	—	—	—	—	—
ИИ _{T302}	0,153	1,684	19,73	20,19	25,33	0,55	−0,50	6,10
ИИ _{T320}	−0,008	1,736	20,57	21,55	25,16	0	0	6,55
ИИ _{T3-20}	0,078	1,740	20,36	20,99	26,05	0	0	6,11
ИИ _{T214} → ИИ _{T205}	—	—	—	—	—	—	—	—
ИИ _{T2-14}	0,066	1,733	20,99	20,22	25,93	−0,12	−0,20	6,34
ИИ _{T412} → ИИ _{T302}	—	—	—	—	—	—	—	—
ИИ _{T4-12}	0,083	1,739	20,84	20,19	26,35	0,24	−0,23	6,29
ИИ _{T421}	0,054	1,714	20,29	20,50	25,62	0,31	−1,12	4,99
ИИ _{T4-21}	0,064	1,763	21,48	20,99	25,83	0,12	−0,06	6,11
ИИ _{T324} → ИИ _{T425}	—	—	—	—	—	—	—	—
ИИ _{T3-24}	0,051	1,754	20,41	20,87	26,65	0,20	0,07	6,18
ИИ _{T423} → ИИ _{T524}	—	—	—	—	—	—	—	—
ИИ _{T4-23}	0,057	1,765	21,66	20,79	25,94	0,24	0,14	6,08
ИИ _{T432} → ИИ _{O442}	—	—	—	—	—	—	—	—
ИИ _{T4-32}	0,061	1,775	21,62	20,55	26,59	0,04	0,11	5,79
ИИ _{T205}	0,085	1,717	20,85	20,35	25,32	−0,03	−0,13	6,28
ИИ _{T502}	0,034	1,754	20,54	20,66	26,77	0,08	−0,41	6,18
ИИ _{T520} → ИИ _{T630}	—	—	—	—	—	—	—	—
ИИ _{T5-20}	0,010	1,775	20,96	21,55	26,26	0	0	6,48
ИИ _{T106}	0,069	1,761	20,39	20,53	27,29	0	0	6,76
ИИ _{T601}	0,032	1,764	20,67	21,41	26,24	0,15	−0,14	6,16
ИИ _{T610} → ИИ _{O620}	—	—	—	—	—	—	—	—
ИИ _{T6-10}	−0,012	1,772	20,84	20,42	27,38	0	0	6,25
ИИ _{T306}	0,003	1,776	20,68	21,27	26,84	0,43	−0,10	6,18
ИИ _{T603}	0,015	1,762	20,66	21,82	25,77	0,28	−0,05	6,19
ИИ _{T630}	0,083	1,724	20,39	19,84	26,55	0	0	5,82
ИИ _{T6-30}	0,025	1,775	21,58	20,55	26,62	0	0	6,24
ИИ _{T425}	0,087	1,731	20,48	20,99	25,61	0,05	−0,36	6,10
ИИ _{T4-25}	−0,002	1,785	22,16	20,92	26,08	0,26	0,10	6,24
ИИ _{T524}	0,079	1,737	20,26	21,19	25,84	0,10	−0,28	6,02
ИИ _{T5-24}	−0,010	1,774	20,69	20,72	27,30	0,16	0,04	6,42
ИИ _{T542} → ИИ _{O442}	—	—	—	—	—	—	—	—
ИИ _{T5-42}	0,026	1,785	20,94	21,38	26,82	−0,01	0,07	6,03
ИИ _{T207}	0,000	1,782	21,37	21,14	26,54	0,12	0,10	6,28
ИИ _{T702}	0,032	1,764	20,67	21,41	26,24	0,15	−0,14	6,16
ИИ _{T720} → ИИ _{O620}	—	—	—	—	—	—	—	—
ИИ _{T7-20}	0,018	1,771	20,73	21,17	26,71	0	0	6,38
ИИ _{T416}	0,005	1,772	21,46	20,60	26,59	0,20	−0,32	6,19
ИИ _{T4-16}	−0,010	1,787	22,33	20,47	26,43	0,22	0,12	6,28
ИИ _{T614}	−0,009	1,782	21,41	20,69	26,95	0,08	−0,28	6,23
ИИ _{T6-14}	−0,017	1,774	20,86	20,41	27,47	0,12	0,05	6,39
ИИ _{T641}	0,060	1,766	21,62	20,68	26,13	0,21	0,22	5,79
ИИ _{T6-41}	0,028	1,784	21,81	21,21	26,09	0,00	0,05	6,11
ИИ _{T506}	−0,017	1,776	20,57	21,79	26,44	0,27	−0,21	6,34
ИИ _{T605}	−0,017	1,775	20,90	21,85	26,01	0,23	−0,20	6,33
ИИ _{T650}	0,074	1,766	21,56	20,38	26,50	0	0	5,92
ИИ _{T6-50}	0,037	1,788	21,77	20,76	26,72	0	0	5,99
ИИ _{T436}	−0,008	1,773	21,57	20,63	26,49	−0,26	−0,43	6,38
ИИ _{T4-36}	0,019	1,785	21,67	20,72	26,77	0,09	0,08	6,21
ИИ _{T634}	−0,025	1,787	21,28	20,76	27,20	0,13	−0,32	6,08
ИИ _{T6-34}	0,015	1,775	21,41	20,52	26,83	0,07	0,04	6,37
ИИ _{T643}	−0,034	1,798	21,49	21,73	26,43	0,20	0,05	5,88
ИИ _{T6-43}	0,009	1,789	21,78	21,42	26,11	0,10	−0,02	6,21

Окончание табл. 8

1	2	3	4	5	6	7	8	9
И _Н ₀₀₀₂	0,141	1,677	19,17	19,17	26,62	0	0	5,78
И _Н ₀₂₀₀ → И _Н _{Т2-10}	—	—	—	—	—	—	—	—
И _Н ₀₂₀₂ → И _Н _{Т302}	—	—	—	—	—	—	—	—
И _Н ₀₂₂₀ → И _Н _{Т230}	—	—	—	—	—	—	—	—
И _Н ₀₂₋₂₀	0,049	1,689	19,67	19,67	26,08	0	0	5,30
И _Н ₀₂₀₄ → И _Н _{Т205}	—	—	—	—	—	—	—	—
И _Н ₀₄₀₂ → И _Н _{Т302}	—	—	—	—	—	—	—	—
И _Н ₀₄₂₀ → И _Н _{Т320}	—	—	—	—	—	—	—	—
И _Н ₀₄₋₂₀ → И _Н _{Т3-20}	—	—	—	—	—	—	—	—
И _Н ₀₂₂₄ → И _Н _{Т025}	—	—	—	—	—	—	—	—
И _Н ₀₂₋₂₄	0,024	1,737	20,01	20,01	27,27	0,20	–0,20	5,80
И _Н ₀₄₂₂ → И _Н _{Т421}	—	—	—	—	—	—	—	—
И _Н ₀₄₋₂₂ → И _Н _{Т4-12}	—	—	—	—	—	—	—	—
И _Н ₀₄₂₄ → И _Н _{Т425}	—	—	—	—	—	—	—	—
И _Н ₀₄₋₂₄ → И _Н _{Т3-24}	—	—	—	—	—	—	—	—
И _Н ₀₄₄₂	0,112	1,733	19,98	19,98	27,19	0,42	0,42	5,76
И _Н ₀₄₋₄₂	0,013	1,768	20,49	20,49	27,52	–0,14	0,14	5,66
И _Н ₀₀₀₆	0,074	1,778	20,46	20,46	27,95	0	0	6,76
И _Н ₀₆₀₀ → И _Н ₀₆₂₀	—	—	—	—	—	—	—	—
И _Н ₀₂₀₆ → И _Н _{Т205}	—	—	—	—	—	—	—	—
И _Н ₀₆₀₂ → И _Н _{Т702}	—	—	—	—	—	—	—	—
И _Н ₀₆₂₀	0,082	1,722	20,11	19,77	26,83	0	0	6,01
И _Н ₀₆₋₂₀ → И _Н _{Т7-20}	—	—	—	—	—	—	—	—
И _Н ₀₄₀₆ → И _Н _{Т416}	—	—	—	—	—	—	—	—
И _Н ₀₆₀₄ → И _Н _{Т614}	—	—	—	—	—	—	—	—
И _Н ₀₆₄₀ → И _Н _{Т650}	—	—	—	—	—	—	—	—
И _Н ₀₆₋₄₀ → И _Н _{Т6-50}	—	—	—	—	—	—	—	—
И _Н ₀₄₂₆ → И _Н _{Т425}	—	—	—	—	—	—	—	—
И _Н ₀₄₋₂₆ → И _Н _{Т4-36}	—	—	—	—	—	—	—	—
И _Н ₀₆₂₄ → И _Н _{Т724}	—	—	—	—	—	—	—	—
И _Н ₀₆₋₂₄ → И _Н _{Т6-34}	—	—	—	—	—	—	—	—
И _Н ₀₆₄₂ → И _Н _{Т641}	—	—	—	—	—	—	—	—
И _Н ₀₆₋₄₂ → И _Н _{Т5-42}	—	—	—	—	—	—	—	—
И _Н ₀₄₄₆ → И _Н _{Т436}	—	—	—	—	—	—	—	—
И _Н ₀₄₋₄₆	–0,025	1,767	20,35	20,35	27,74	0,10	–0,10	5,90
И _Н ₀₆₄₄ → И _Н _{Т634}	—	—	—	—	—	—	—	—
И _Н ₀₆₋₄₄ → И _Н _{Т6-54}	—	—	—	—	—	—	—	—

Примечание: стрелка указывает, в какую конфигурацию переходит исходный ИН-комплекс во время релаксации.

Наиболее энергетически выгодной конфигурацией среди всех рассмотренных (см. табл. 8) является конфигурация И_Н_{Т302} с энергией связи 0,153 эВ и 0,158 эВ для наборов потенциалов М07R13 и А04R09В соответственно. Второй по устойчивости конфигурацией является И_Н₀₀₀₂ с энергией связи 0,141 эВ и 0,118 эВ для наборов потенциалов М07R13 и А04R09В соответственно. Максимальная энергия связи ИН-комплексов в разы меньше, чем для VН-комплексов, однако энергия взаимодействия атома Н с СМА спадает с расстоянием заметно медленнее, чем в случае взаимодействия с вакансией. Так, энергия взаимодействия СМА с некоторыми конфигурациями Н_Т превышает 0,07 эВ, когда атом Н находится на расстоянии более 1,9 параметра решётки от СМА.

Некоторые конфигурации Н_Т вблизи СМА становятся неустойчивыми и в процессе релаксации перестраиваются в близлежащие конфигурации Н_О, обладающие сравнительно высокими значениями энергии связи (см. табл. 8). Большая часть конфигураций Н_О становятся неустойчивыми в поле деформаций СМА и в процессе релаксации перестраиваются в конфигурации Н_Т (см. табл. 8).

Комплексы «вакансия—несколько атомов водорода». Вакансия способна удерживать несколько атомов Н одновременно. В [2] были рассчитаны энергии связи комплексов VН_{*n*}, *n* = 1, ..., 6. Под энергией связи имеется в виду энергия, необходимая для захвата дополнительного атома Н вакансией, относительно энергии растворения водорода в объёме:

$$E^B(VH_n) = [E(Fe_mH) - E(Fe_m)] - [E(Fe_{m-1}H_n) - E(Fe_{m-1}H_{n-1})]. \quad (8)$$

Последовательность, в которой атомы Н предположительно захватываются вакансией: Н₀₀₀₋₂, Н₀₀₀₂, Н₀₀₂₀, Н₀₀₋₂₀, Н₀₂₀₀, Н₀₋₂₀₀. Для проверки результатов [2] мы повторили расчёты энергии связи VН_{*n*}-комплексов

с набором потенциалов A04R09B. Полученные результаты и результаты [2] сведены в табл. 9. В табл. 10 приведены координаты атомов H в вакансии после релаксации. Сравнение показывает, что результаты настоящей работы практически совпадают с данными [2] для комплексов VH_n с $n = 1, \dots, 4$. Для комплексов VH_5 и VH_6 рассчитанные значения энергии связи заметно превышают данные [2]. По всей видимости, это означает, что в [2] не были найдены наиболее энергетически выгодные конфигурации VH_5 и VH_6 .

Таблица 9. Энергия связи (эВ), релаксационный объём (в атомных объёмах) и дипольный тензор P_{ij} (эВ) в кристаллографической системе координат комплексов VH_n , рассчитанные с набором потенциалов A04R09B

Номер	E^B	V^R	P_{11}	P_{22}	P_{33}	P_{23}	P_{13}	P_{12}
1	0,603; 0,609 ¹	-0,152	-1,99	-1,99	-1,92	0	0	0
2	0,603; 0,609 ¹	-0,090	-1,23	-1,23	-1,04	0	0	0
3	0,426; 0,432 ¹	0,182	2,06	3,08	1,92	0	0	0
4	0,306; 0,299 ¹	0,554	6,47	7,50	7,50	0	0	0
5	0,271; 0,242 ¹	0,713	7,19	10,22	10,22	0	0	0
6	0,341; 0,084 ¹	1,090	12,73	12,73	16,77	0	0	0

¹ [2].

² [7].

Таблица 10. Координаты x, y, z кристаллографической системы координат (в половинах постоянной решётки) атомов водорода в вакансии после релаксации для комплексов VH_n , рассчитанные с набором потенциалов A04R09B

Номер атома H	Координата	VH	VH_2	VH_3	VH_4	VH_5	VH_6
1	x	0	0	0	0,3686	-0,2571	0
	y	0	0	-0,3071	0	0	0
	z	-0,7935	-0,7984	-0,8215	-0,8997	-1,0043	-1,0112
2	x	—	0	0	0,3686	-0,2571	0
	y	—	0	-0,3071	0	0	0
	z	—	0,7984	0,8215	0,8997	1,0043	1,0112
3	x	—	—	0	-0,3686	-0,2571	0,4143
	y	—	—	0,9099	0,8997	1,0043	0,9866
	z	—	—	0	0	0	0
4	x	—	—	—	-0,3686	-0,2571	-0,4143
	y	—	—	—	0,8997	-1,0043	-0,9866
	z	—	—	—	0	0	0
5	x	—	—	—	—	0,8851	0,9866
	y	—	—	—	—	0	-0,4143
	z	—	—	—	—	0	0
6	x	—	—	—	—	—	-0,9866
	y	—	—	—	—	—	0,4143
	z	—	—	—	—	—	0

В табл. 11, 12 сведены результаты аналогичных расчётов для набора межатомных потенциалов M07R13. Отметим, что конфигурации VH_5 обладают различной симметрией по результатам расчётов с наборами потенциалов A04R09B и M07R13.

Таблица 11. Энергия связи (эВ), релаксационный объём (в атомных объёмах) и дипольный тензор P_{ij} (эВ) в кристаллографической системе координат комплексов VH_n , рассчитанные с набором потенциалов M07R13

Номер атома	E^B	V^R	P_{11}	P_{22}	P_{33}	P_{23}	P_{13}	P_{12}
1	0,536	-0,005	-0,11	-0,11	0,04	0	0	0
2	0,535	0,085	0,97	0,97	1,32	0	0	0
3	0,451	0,310	3,69	4,36	3,98	0	0	0
4	0,350	0,593	6,94	8,02	8,02	0	0	0
5	0,375	0,765	8,98	10,33	10,33	0	0	0
6	0,359	0,983	13,39	12,34	12,34	0	0	0

Таблица 12. Координаты x, y, z кристаллографической системы координат (в половинах постоянной решётки) атомов H в вакансии после релаксации для комплексов VH_n , рассчитанные с набором потенциалов M07R13

Номер атома H	Координата	VH	VH_2	VH_3	VH_4	VH_5	VH_6
1	2	3	4	5	6	7	8
1	x	0	0	0	-0,2650	-0,1360	0
	y	0	0	-0,2422	0	-0,1058	-0,2642
	z	-0,8327	-0,8363	-0,8652	-0,9385	-0,9881	-0,9925

Окончание табл. 12

1	2	3	4	5	6	7	8
2	x	—	0	0	-0,2650	-0,1360	0
	y	—	0	-0,2422	0	0,1058	0,2642
	z	—	0,8363	-0,8652	0,9385	0,9881	0,9925
3	x	—	—	0	0,2650	-0,1360	0
	y	—	—	0,9149	0,9385	0,9881	0,9925
	z	—	—	0	0	-0,1058	-0,2642
4	x	—	—	—	0,2650	-0,1360	0
	y	—	—	—	-0,9385	-0,9881	-0,9925
	z	—	—	—	0	0,1058	0,2642
5	x	—	—	—	—	0,9381	1,0016
	y	—	—	—	—	0	0
	z	—	—	—	—	0	0
6	x	—	—	—	—	—	-1,0016
	y	—	—	—	—	—	0
	z	—	—	—	—	—	0

Численные результаты [2] и настоящей работы для энергии связи комплексов VH_n для различных наборов потенциалов и ТФЭП-расчётов [7] для удобства сравнения представлены графически

Рис. 2. Энергия связи n атомов Н в вакансии в ОЦК-железе: ■ — ТФЭП [7]; ● — A04R09B [2]; ○ — A04R09B; ◆ — M07R13

слегка больше, чем для краевой дислокации с вектором Бюргерса $1/2\langle 111 \rangle$: 0,487 эВ и 0,484 эВ для набора потенциалов M07R13 и A04R09B соответственно.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Модифицирован многочастичный потенциал, описывающий взаимодействие между атомами железа и водорода (исходный потенциал [2]), для использования в матрице ОЦК-железа, взаимодействие в которой описывается многочастичным потенциалом [5].

Рассчитаны энергетические и кристаллографические характеристики различных конфигураций атома водорода и его комплексов с собственными точечными дефектами и с краевой дислокацией с вектором Бюргерса $\langle 100 \rangle$ в ОЦК-железе методом молекулярной статики с использованием предложенного в настоящей работе модифицированного и исходного набора потенциалов межатомного взаимодействия.

Полученные с использованием предложенного потенциала результаты в целом согласуются с известными из литературы данными о свойствах водорода в железе (экспериментальные данные, расчёты в рамках теории функционала электронной плотности).

Авторы выражают благодарность профессору, д.ф.-м.н. В.М. Чернову и к.ф.-м.н. В.А. Романову за полезные обсуждения и замечания и постоянный интерес к исследованиям. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант РФФИ 12-02-33018).

REFERENCES

1. **Vehoff H.** Hydrogen related material problems. — In: *Hydrogen in Metals III: Properties and Applications*. Ed. by H. Wipf (Topics in Applied Physics: vol. 73). — Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 1997, pp. 215—278.
2. **Ramasubramaniam A., Itakura M., Carter E.A.** Interatomic potentials for hydrogen in α -iron based on density functional theory. — *Phys. Rev. B*, 2009, vol. 79, p. 174101-1-13; *Phys. Rev. B*, 2010, vol. 81, p. 099902-1.
3. **Mendelev M.I., Han S., Srolovitz D.J., Ackland G.J., Sun D.Y., Asta M.** Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron. — *Philos. Mag.*, 2003, vol. 83, pp. 3977—3994.
4. **Ackland G.J., Mendelev M.I., Srolovitz D.J., Han S., Barashev A.V.** Development of an interatomic potential for phosphorus impurities in α -iron — *J. Phys. Condens. Matter.*, 2004, vol. 16, pp. S2629—S2642.
5. **Malerba L., Marinica M.C., Anento N., Björkas C., Nguyen H., Domain C., Djurabekova F., Olsson P., Nordlund K., Serra A., Terentyev D., Willaime F., Becquart C.S.** Comparison of empirical interatomic potentials for iron applied to radiation damage studies. — *J. Nucl. Mater.*, 2010, vol. 406, pp. 19—38.
6. **Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark U.** *The Stopping and Range of Ions in Solids*. — New York: Pergamon, 1985.
7. **Tateyama Y., Ohno T.** Stability and clusterization of hydrogen-vacancy complexes in α -Fe: an ab initio study. — *Phys. Rev. B*, 2003, vol. 67, 174105-1-10.
8. **Hirth J.P.** Effects of hydrogen on the properties of iron and steel. — *Metall. Mater. Trans. A*, 1980, vol. 11, pp. 861—890.
9. **Hayashi Y., Shu W.M.** Iron (ruthenium and osmium)-hydrogen systems. — *Solid State Phenom.*, 2000, vol. 73—75, pp. 65—114.
10. **Grabke H.J., Riecke E.** Absorption and diffusion of hydrogen in steels. — *Mater. Technol.*, 2000, vol. 34, pp. 331—342.
11. **Myers S.M., Baskes M.I., Birnbaum H.K., Corbett J.W., DeLeo G.G., Estreicher S.K., Haller E.E., Jena P., Johnson N.M., Kirchheim R., Pearton S.J., Stavola M.J.** Hydrogen interactions with defects in crystalline solids. — *Rev. Mod. Phys.*, 1992, vol. 64, pp. 559—617.

AUTHORS

Sivak A.B. NRC “Kurchatov Institute”, pl. Kurchatova 1, 123182 Moscow, Russia; Sivak_AB@nrcki.ru

Sivak P.A. NRC “Kurchatov Institute”, pl. Kurchatova 1, 123182 Moscow, Russia; Sivak_PA@nrcki.ru

Received 11 June 2013
Problems of Atomic Science and Technology
Ser. Termoyadernyi sintez, 2013, vol. 36, issue 3, pp.74—85