

ВЛИЯНИЕ ПРИМЕСЕЙ НА РАСТВОРЕНИЕ ВОДОРОДА В ОЦК-ЖЕЛЕЗЕ

А.А. Мирзоев, Д.А. Мирзаев, М.С. Ракитин

С помощью расчетов из первых принципов на основе теории функционала плотности рассмотрено влияние малых примесей замещения (Pd, Ti, Cr, Mn, V) на энергию растворения водорода в ОЦК-решетке железа. Исследованы объемные эффекты при введении примесей в металл. Выяснено, что наибольшее влияние на энергию растворения водорода оказывают примесью атомы Pd, Ti и Cr, что объясняет захват водорода этими примесями.

Ключевые слова: адсорбция водорода, водородные ловушки, сплавы железа, теория функционала плотности, квантово-химическое моделирование, WIEN2k.

Введение

Проблемы, возникающие при взаимодействии водорода с железом и его сплавами, известны металлургам еще с XIX века. В 1875 г. Джонсон [1] отметил, что водород в железе и сталях вызывает уменьшение пластичности. Исследования показали, что адсорбированный водород может значительно изменять механические свойства металла, тем самым вызывая его разрушение. Существенные усилия исследователей в этой области были направлены на изучение процессов растворения водорода в железе и его сплавах как в твердом, так и в жидком агрегатных состояниях для выяснения природы поведения водорода (например, [2, 3]). В 1980 г. вышел обзор Хирша [4], в котором были собраны и обсуждены результаты всех вышедших к этому моменту работ по растворению водорода в железе и его сплавах.

Существенное влияние на процессы захвата и удержания водорода в железе могут оказывать примеси, что открывает путь к управлению его растворимостью и предотвращению негативных воздействий на механическую прочность водородных трещин (флокенов). До недавнего времени в литературе почти отсутствовали сведения о влиянии легирующих элементов на растворимость водорода за исключением относительно старых монографий Гельда [5, 6]. Благодаря работам Архарова [7, 8] стало известно о сильном воздействии примесей палладия. Было показано, что малые добавки палладия (< 0,5 ат. %) в значительной мере, если не полностью, подавляют флокенообразование благодаря тому, что атомы палладия сильно притягивают к себе атомы водорода, не давая им диффундировать и скапливаться. Некоторые попытки исследования сплавов железа с палладием были сделаны в работе [9]. Эксперименты проводились на многослойных пленках Pd/Fe. Было выяснено, что диффузия водорода через изучаемые слои существенно уменьшается, что говорит о том, что палладий в железе захватывает водород, не давая ему диффундировать. Изучению электронных свойств Fe–Pd с внедренным водородом посвящена работа [10], где рассматриваются ГЦК и ГЦТ решетки с высокими концентрациями палладия. В обеих структурах происходит процесс адсорбции водорода. Расстояния Pd–H в ГЦК и ГЦТ структурах составляют 3,19 а.е. и 3,53 а.е. соответственно, что меньше стехиометрического расстояния в гидриде Pd–H (3,87 а.е.). Анализ электронной структуры показал, что природа взаимодействия Fe–H и Pd–H имеет локальный характер. Пики в плотностях состояний, связанные с внедрением водорода, возникают при энергиях 15–16 эВ (1,1–1,2 Р6), т.е. 1s уровень водорода расположен ниже дна *d*-зоны. Похожие результаты наблюдаются и при растворении водорода в ГЦК-железе с вакансиями, водород растворяется в позициях, близких к тетраэдрическим порам [11]. Стоит отметить, что подобных исследований растворения водорода в ОЦК-железе с палладием ранее не проводилось.

Наряду с описанными выше работами последние публикации [12–15] показывают, что наиболее интересными элементами с точки зрения захвата водорода являются палладий, титан, хром, ванадий и некоторые другие переходные металлы. В работе Кульковой и др. [12] показано, что поверхность Pd/TiFe (110) обладает хорошими адсорбционными свойствами, при этом палладий значительно увеличивает адсорбцию по сравнению с чистой поверхностью TiFe (001). Исследование [13] показало, что поверхности FeTi (001), (110) и (111) охотно адсорбируют водород в мо-

лекулярном и атомарном состояниях. В [14] выяснено, что наибольшей поглощающей водород способностью обладает сплав $Ti_{0,85}VFe_{0,15}$, однако с ростом концентрации железа адсорбция существенно уменьшается. Там же было показано, что при замещении ванадия атомами хрома ($Ti_{0,8}V_{0,4}Fe_{0,2}Cr_{0,6}$) процесс адсорбции не требует термического воздействия в процессе активации. В недавнем исследовании [15] изучались свойства сплавов $V_{30}-Ti-Cr-Fe$, было показано, что адсорбция водорода зависит от отношения $Ti/(Fe+Cr)$, при этом наиболее эффективное поглощение водорода наблюдалось при отношении, равном 1. Наиболее адсорбирующим оказался сплав $V_{0,30}Ti_{0,35}Cr_{0,25}Fe_{0,10}$.

Наиболее полное исследование взаимодействия водорода с точечными дефектами в железе проведено методами первопринципного моделирования в недавней работе [16], где получены значения энергии связи водорода с атомами Mg, Al, Si, Sc, Ti, V, Cr, Mn, Co, Ni, Cu, Zn, Y, Nb, Mo и Cd. Оказалось, что энергия связи водорода с Si, Cr, Mn, Co, и Mo близка к нулю, а остальные примеси замещения захватывают водород с положительной энергией связи до 0,25 эВ. Данные результаты представляют несомненный интерес, однако следует отметить, что полученные значения энергии взаимодействия находятся на пределе вычислительной точности первопринципного моделирования, в силу чего нуждаются в дополнительном подтверждении. Кроме того, в литературе (включая и работу [16]) отсутствуют данные о влиянии малых примесей палладия на растворение водорода в ОЦК-железе. Поэтому, продолжая исследование, начатое в работах [17] и [18], мы поставили перед собой задачу исследования влияния малых примесей палладия, титана, хрома, марганца и ванадия на растворимость водорода в ОЦК-железе, а также в определении энергии взаимодействия водорода с указанными примесями.

Методика моделирования

Моделирование проводилось с помощью программного пакета WIEN2k [19], реализующего метод линейаризованных присоединенных плоских волн (ЛППВ), который является полноэлектронным методом теории функционала плотности. Использовалось приближение обобщенного градиента плотности с обменно-корреляционным потенциалом GGA-PBE96 [20], широко используемым в последнее время в работах по исследованию растворения водорода в α -железе [например, 2]. Суперячейка во всех расчетах состояла из 54 узлов ОЦК-решетки, заполненных 53 атомами железа и 1 атомом примеси замещения, а также внедренного атома водорода. На первых этапах моделирования без учета структурной релаксации использовался параметр кристаллической решетки, равный экспериментальному значению для α -железа без примесей (5,4169 а.е.) [21], а когда проводилась релаксация кристаллической решетки, этот параметр варьировался. Исследования в работе [18] с использованием пакета WIEN2k показали, что достаточно использовать следующие значения основных параметров моделирования: $K_{max} = 5,0 \text{ а.е.}^{-1}$ (что соответствует энергии обрезания плоских волн, равной 340 эВ) и количество k -точек, большее 20 для элементарной ячейки из 54 атомов железа и 1 атома водорода. Количество k -точек выбиралось равным 24, радиус МТ-сфер атомов железа был равен 2,0 а.е., а примесных атомов Pd, Ti, Cr, Mn, V – 2,2 а.е. Нами было проверено, что изменение радиусов МТ-сфер качественно не влияет на результат. В этой же работе [18] были подтверждены данные из [2] и [16], что атом водорода предпочтительно оккупирует тетраэдрическую позицию в α -железе, поэтому основные вычислительные усилия в настоящей работе были направлены на случай растворения водорода в этой позиции в присутствии малых примесей, хотя было проведено несколько серий расчетов для случая занятия водородом октаэдрической поры с целью доказательства меньшей стабильности этой позиции даже в присутствии малых металлических примесей замещения. Были исследованы первые 5 окружений водорода, когда атомы примесей постепенно удалялись от атома водорода, последовательно замещая один из атомов железа. Критериями сходимости во всех расчетах были полная энергия и заряд с точностью более 10^{-4} Рб и $10^{-3} e^-$ соответственно, а в случае релаксации кристаллической решетки дополнительно использовался критерий сходимости по силам с точностью не хуже 2 мРб/а.е. Структурная релаксация состояла из объемной оптимизации с минимизацией внутренних координат. Объемная оптимизация осуществлялась для равных параметров решетки ($a = b = c$), т.е. проводилось равномерное расширение и сжатие, было рассмотрено по 7 конфигураций для каждого состава с изменением параметра решетки от -1% до $+1\%$ с шагом $0,33\%$ от экспериментального параметра решетки ОЦК-железа. На каждом шаге изменения объема ячейки (параметра решетки) проводилась минимизация внутренних координат, т.е. проводился поиск

стабильной конфигурации с минимальной полной энергией и действующими на атомы силами, близкими к нулю. На каждом шаге минимизации проводился самосогласованный расчет электронной структуры. Моделирование производилось на высокопроизводительном вычислительном кластере СКИФ Урал [22] в параллельном режиме.

Моделирование растворения водорода в ОЦК-железе с малыми примесями переходных металлов (Pd, Ti, Cr, Mn и V) без учета структурной релаксации

Важной характеристикой в оценке захвата и удержания водорода является энергия растворения. Она рассчитывается следующим образом:

$$\Delta E(H) = E(Fe_{n-1}MeH) - E(Fe_{n-1}Me) - \frac{1}{2}E[H_{2(g)}], \quad (1)$$

где $\Delta E(H)$ – энергия растворения атома водорода в кристалле ОЦК-железа с примесями Me; $E(Fe_{n-1}MeH)$ и $E(Fe_{n-1}Me)$ – полные энергии $Fe_{n-1}MeH$ и $Fe_{n-1}Me$ соответственно; n – размер суперячейки, в нашем случае – 54; $E[H_{2(g)}]$ – полная энергия молекулы водорода. Во всех исследованиях энергия $E[H_{2(g)}]$ принималась равной – 2,346 Рб, что соответствует общепринятому экспериментальному значению [2, 23].

Для вычисления энергии растворения с использованием выражения (1) и для выявления примесей, оказывающих наиболее существенное влияние на растворение водорода, было проведено несколько серий расчетов полной энергии систем $Fe_{53}MeH$ ($Me = Pd, Ti, Cr, Mn, V$) с описанными выше параметрами моделирования, однако без учета структурной релаксации. Эти расчеты были выполнены для выявления примесей, наиболее сильно влияющих на энергию растворения водорода. Здесь параметр решетки был равен экспериментальному значению для чистого ОЦК-железа.

На рис. 1 представлены результаты расчетов энергии растворения водорода в тетраэдрической позиции ОЦК-решетки железа в зависимости от примеси замещения (Pd, Ti, Cr, Mn, V) и от расстояния атома водорода от этой примеси. Из графика видно, что наиболее существенное влияние на энергию растворения водорода оказывают примесные атомы палладия, титана и хрома. Атомы марганца и ванадия практически не изменяют энергию растворения водорода при удалении от него, т.е. нет наиболее предпочтительного окружения для захвата водорода этими примесями. Для всех составов кроме $Fe_{53}MnH$ и $Fe_{53}VH$ наименьшая энергия растворения водорода получается при расположении атома водорода в третьем окружении примесного атома. Это можно трактовать, как захват атома водорода примесью в ее третье окружение. При увеличении размера решетки до 96 атомов, т.е. при уменьшении концентрации примесей и водорода примерно в 2 раза полученная закономерность сохраняется.

Таким образом, наибольший интерес с точки зрения захвата водорода представляют примесные атомы палладия, титана и хрома.

На рис. 2 отражена зависимость энергии растворения водорода в октаэдрической позиции ОЦК-железа в зависимости от используемой примеси и от расстояния от этой примеси. Можно заметить, что в сравнении с предыдущим случаем качественно картина не изменилась. В данном случае наиболее существенное влияние на энергию растворения оказывают атом титана, находящийся во втором окружении водорода, и атомы палладия и хрома, находящиеся в третьем окружении водорода. Марганец и ванадий, как и в случае растворения водорода в тетраэдрической

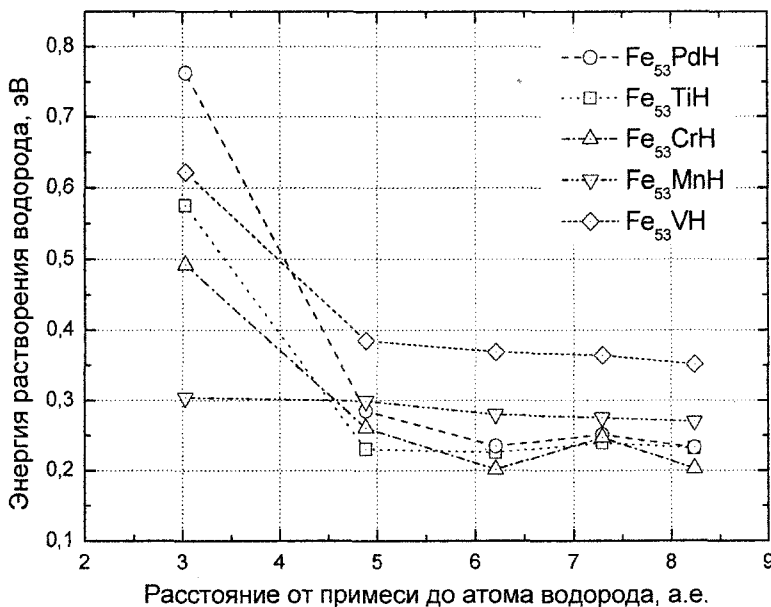


Рис. 1. Зависимость энергии растворения водорода в тетраэдрической позиции ОЦК-железа от примеси и от расстояния атома водорода от примеси без структурной релаксации

поре, менее всего влияют на энергию растворения водорода. Следует отметить, что энергия растворения водорода в октаэдрической позиции в присутствии рассматриваемых примесей оказывается выше энергии растворения водорода в тетраэдрической позиции, как и в случае ОЦК-железа без примесей. Следовательно, рассматриваемые примеси не влияют на энергетическую стабильность позиции растворения водорода в ОЦК-железе.

Описанные исследования были проведены без учета структурной релаксации, которая предъявляет существенные требования к вычислительным ресурсам. Они были нужны для исключения примесей, не влияющих на положение водорода в металле. Поскольку энергетически наиболее выгодной позицией растворения водорода в присутствии примесей является тетраэдрическая пора, и наибольшее влияние на энергию растворения водорода оказывают примеси палладия, титана и хрома, последующие исследования с учетом структурной релаксации были проведены именно для случая растворения водорода в тетраэдрической поре ОЦК-железа с примесными атомами палладия, титана и хрома.

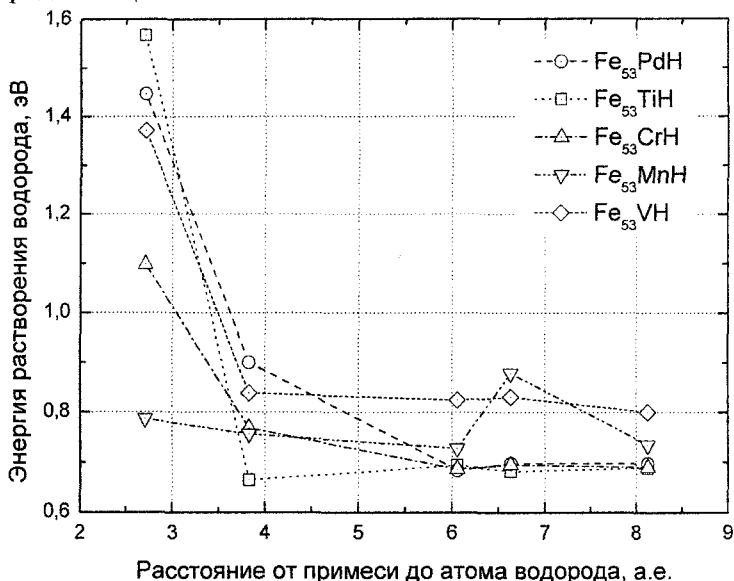


Рис. 2. Зависимость энергии растворения водорода в октаэдрической позиции ОЦК-железа от примеси и от расстояния атома водорода от примеси без структурной релаксации

Моделирование растворения водорода в ОЦК-железе с малыми примесями переходных металлов (Pd, Ti, Cr) с учетом структурной релаксации

Энергия связи дает информацию о том, насколько сильно примесный атом замещения притягивает атом водорода. Рассчитывается она по следующей формуле (2):

$$E_{cb}(H-Me) = E(Fe_nH) - E(Fe_{n-1}MeH), \quad (2)$$

где $E_{cb}(H-Me)$ – энергия связи атома водорода с атомом Me в ОЦК-железе; $E(Fe_{n-1}MeH)$ и $E(Fe_nH)$ – полные энергии $Fe_{n-1}MeH$ и Fe_nH соответственно; $n = 54$.

С использованием выражения (2) нами была рассчитана энергия связи атома водорода с исследуемыми примесями замещения (Pd, Ti, Cr) по аналогии с работой [16]. Результаты сравнения приведены в табл. 1.

Таблица 1

Энергия связи водорода с примесями в позиции с минимальной энергией растворения

Система	Энергия связи, эВ (наши данные)	Энергия связи, эВ (данные из [16])	Энергия связи, эВ (эксперимент)
H-Pd	0,087	–	–
H-Ti	0,091	0,08	0,19 [24]
H-Cr	0,032	0,00	0,10 [25]

Из табл. 1 видно, что полученная нами энергия растворения достаточно хорошо согласуется с результатами работы [16] и с экспериментальными данными из [24, 25]. В отличие от нулевого значения из [16] нами получено, что хром имеет ненулевую энергию связи, а значит, способен связываться с водородом. Энергия связи водорода с палладием оказалась равной 0,087 эВ, что подтверждает, что атом палладия охотно захватывает водород.

Рис. 3 отражает результаты моделирования растворения водорода в ОЦК-железе с малыми примесями переходных металлов (Pd, Ti и Cr) с учетом структурной релаксации. Из графика можно заметить, что позиции с минимальной энергией растворения водорода соответствует второе окружение атомов палладия и титана, а также третье окружение атома хрома. Сплошной горизонтальной линией отмечен уровень энергии растворения водорода в ОЦК-железе без приме-

сей. Величина этой энергии составляет 0,267 эВ, которая с хорошей точностью соответствует экспериментальному значению из работы [4], которое равно 0,296 эВ.

Видно, что все примеси понижают энергию растворения водорода, т.е. увеличивают его растворимость. Следует отметить, что при расположении примесного атома палладия в первом окружении атома водорода (первая точка слева), последний в процессе релаксации смещался в соседнюю тетраэдрическую позицию, отдаляясь от атома палладия и оказываясь в положении, близком к его второму окружению. Такой ситуации в случае с примесью титана и хрома не наблюдалось.

Структурная релаксация показала, что атом водорода увеличивает параметр решетки на 0,24 % от параметра решетки чистого ОЦК-железа. Малые примеси палладия, титана и хрома изменяют параметр решетки ОЦК-железа с водородом в большую сторону на 0,45, 0,16 и 0,10 % соответственно. Подробные данные приведены в табл. 2.

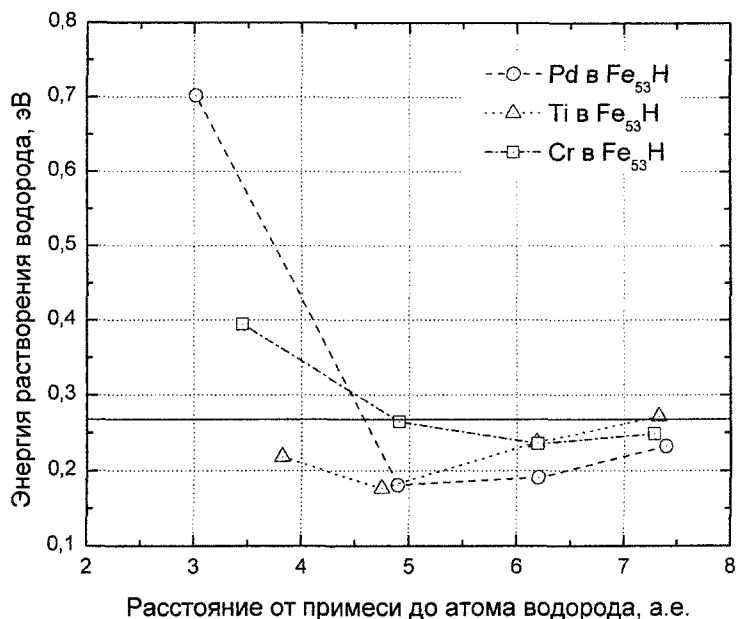


Рис. 3. Зависимость энергии растворения водорода в тетраэдрической позиции ОЦК-железа от примеси и от расстояния атома водорода от примеси с учетом структурной релаксации

Таблица 2

Параметры решетки чистого ОЦК-железа и ОЦК-железа с примесями

Сплав	Параметр решетки a , а.е.	Параметр решетки a с водородом, а.е.
Fe ₅₄	5,362	5,375
Fe ₅₃ Pd	5,388	5,399
Fe ₅₃ Ti	5,373	5,384
Fe ₅₃ Cr	5,368	5,381

Больше всего изменяют решетку ОЦК-железа атомы палладия как в случае без водорода, так и с водородом. Наблюдаются изменения решетки и атомами титана и хрома, хотя они не столь значительны.

Таким образом, с учетом структурной релаксации кристаллической решетки примесные атомы палладия и титана захватывают водород во второе окружение, а примесные атомы хрома – в третье. Внедряя малые примеси палладия, титана или хрома в сплавы на основе железа при их производстве можно добиться захвата и удержания водорода этими примесями, что позволит снизить адсорбцию и диффузию водорода, и, в конечном итоге, водородное охрупчивание.

Выводы

Проведенное исследование позволило определить энергии растворения водорода в тетраэдрической и октаэдрической позициях ОЦК-железа в зависимости от расстояния до примесей палладия, титана, хрома, марганца и ванадия. При введении примесей в ОЦК-железо энергетически наиболее предпочтительной позицией для растворения водорода остается тетраэдрическая пора. Показано, что атомы марганца и ванадия слабо влияют на энергию растворения водорода в ОЦК-железе, что находится в хорошем согласии с данными работы [16], однако результаты для примеси хрома оказались различающимися. Выяснено, что наиболее существенное влияние на энергию растворения оказывают атомы палладия, титана и хрома. Атомы палладия и титана захватывают водород во второе окружение, атом хрома – в третье. В исследовании получено, что примеси внедрения и замещения значительно изменяют объем кристаллической решетки ОЦК-железа, поэтому очень важно учитывать этот факт в подобных расчетах. Введение малых концентраций

примесей палладия, титана и хрома может повысить растворимость водорода при охлаждении сплава, что позволит уменьшить негативное влияние водорода на свойства сталей.

Работа выполнена при финансовой поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009–2013 годы» (ГК № 02.740.11.0539).

Литература

1. Johnson, W.H. On some remarkable changes produced in iron and steel by the action of hydrogen and acids. / W.H. Johnson // In: Beachem CD, editor. Proceedings of the Royal Society of London. – 1875. – V. 23 (reproduced in «Hydrogen damage»). American Society for Metals, Ohio, 1977.
2. Jiang, D.E. Diffusion of interstitial hydrogen into and through BCC Fe from first principles / D.E. Jiang, E.A. Carter // Phys. Rev. B. – 2004. – V. 70. – P. 064102–064111.
3. Structure of liquid iron hydrogen alloy under high pressure / Y. Katayama, H. Saitoh, Y. Yomogida, K. Aoki // Journal of Physics: Conference Series. – 2010. – V. 215. – P. 012080_1–012080_4.
4. Hirth, J.P. Effects of Hydrogen on the Properties of Iron and Steel / J.P. Hirth // Metall. Trans. A. – 1980. – V. 11A. – P. 861–890.
5. Гельд, П.В. Водород и несовершенства структуры металла / П.В. Гельд, Р.А. Рябов, Е.С. Кодес. – М.: Metallургия, 1979. – 221 с.
6. Гельд, П.В. Водород в металлах и сплавах / П.В. Гельд, Р.А. Рябов. – М.: Metallургия, 1974. – 272 с.
7. Архаров, В.И. О влиянии примеси палладия к железу на его проницаемость для водорода / В.И. Архаров, А.А. Кралина // ФММ. – 1959. – Т. 8. – Вып. 1. – С. 45–52.
8. О возможности снижения склонности стали к флокенообразованию посредством малых добавок палладия / В.И. Архаров, А.А. Кралина, Л.И. Кватер, П.В. Склюев // Изв. АН СССР. Металлы. – 1967. – № 1. – С. 105–111.
9. Hydrogen permeation through Pd/Fe and Pd/Ni multilayer systems / K. Yamakawa, M. Ege, M. Hirscher *et al.* // Journal of Alloys and Compounds. – 2005. – V. 393. – P. 5–10.
10. Gonzalez, E.A. The effect of interstitial hydrogen on the electronic structure of Fe–Pd alloys / E.A. Gonzalez, P.V. Jansen, N.J. Castellani, A. Juan // Journal of Physics and Chemistry of Solids. – 2004. – V. 65. – P. 1799–1807.
11. Ardenghi, S. The hydrogen interaction in an FCC FePd alloy with a vacancy / S. Ardenghi, E. Gonzalez, P. Jansen, A. Juan // Phys. Scr. – 2009. – V. 79. – P. 1–5.
12. Kulkova, S.E. Hydrogen adsorption on Pd/TiFe (110) surface / S.E. Kulkova, S.V. Ereemeev, V.E. Egorushkin, J.S. Kim, S.Y. Oh // Solid State Communications. – 2003. – V. 126. – P. 405–408.
13. Izanlou, A. An *ab initio* study of dissociative adsorption of H₂ on FeTi surfaces / A. Izanlou, M.K. Aydinol // International Journal of Hydrogen Energy. – 2010. – V. 35. – P. 1681–1692.
14. Basak, S. Hydrogen absorption properties of Ti–V–Fe alloys: Effect of Cr substitution / S. Basak, K. Shashikala, P. Sengupta, S.K. Kulshreshtha // International Journal of Hydrogen Energy. – 2007. – V. 32. – P. 4973–4977.
15. Hydrogen storage properties of V30–Ti–Cr–Fe alloys / Y. Yan, Y. Chen, H. Liang, C. Wu, M. Tao // Journal of Alloys and Compounds. – 2007. – V. 427. – P. 110–114.
16. Counts, W.A. First-principles energetics of hydrogen traps in α -Fe: Point defects / W.A. Counts, C. Wolverton, R. Gibala // Acta Materialia. – 2010. – V. 58. – P. 4730–4741.
17. Мирзоев, А.А. Компьютерное моделирование влияния структурной релаксации и примесей на энергию растворения H в Fe / А.А. Мирзоев, М.С. Ракидин // Компьютерное моделирование физико-химических свойств стекол и расплавов: Труды IX Российского семинара. – Курган: Изд-во КГУ, 2008. – С. 91–93.
18. Ракидин, М.С. Изменение электронной структуры α -железа, содержащего внедренные атомы водорода / М.С. Ракидин, А.А. Мирзоев, Д.А. Мирзаев // Вестник ЮУрГУ. Серия «Metallургия». – 2010. – Вып. 14. – № 13. – С. 67–71.
19. Schwarz, K. Electronic structure calculations of solids using the WIEN2k package for material science / K. Schwarz, P. Blaha, G.K.H. Madsen // Computer Physics Communications. – 2002. – V. 147. – P. 71–76.
20. Perdew, J.P. Generalized Gradient Approximation Made Simple / J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof // Phys. Rev. Lett. – 1996. – V. 77. – P. 3865–3868.

21. Cottenier, S. Density Functional Theory and the family of (L)APW-methods: a step-by-step introduction / S. Cottenier // Instituut voor Kern-en Stralingsfysica, K.U. Leuven, Belgium – 2002. – ISBN 90-807215-1-4 (to be found at http://www.wien2k.at/reg_user/textbooks).
22. Высокопроизводительный вычислительный кластер СКИФ-Урал (http://supercomputer.susu.ru/computers/skif_ural/).
23. Эмсли, Дж. Элементы / Дж. Эмсли. – М: Мир, 1993. – 255 с.
24. Myers, S.M. Hydrogen interactions with defects in crystalline solids / S.M. Myers, M.I. Baskes, H.K. Birnbaum, J.W. Corbett, G.G. DeLeo, S.K. Estreicher, E.E. Haller, P. Jena, N.M. Johnson, R. Kirchheim, S.J. Pearton, M.J. Stavola // Rev. Mod. Phys. – 1992. – V. 64. – P. 559–617.
25. Thomas, R. Trap-governed hydrogen diffusivity and uptake capacity in ultrahigh-strength AERMET 100 steel / R. Thomas, D. Li, R. Gangloff, J. Scully // Metallurgical and Materials Transactions A. – 2002. – V. 33. – P. 1991–2004.

Поступила в редакцию 18 марта 2011 г.

INFLUENCE OF IMPURITIES ON HYDROGEN DISSOLUTION IN BCC IRON

Influence of small concentrations of impurities (Pd, Ti, Cr, Mn, V) on hydrogen dissolution energy in bcc iron has been investigated by *ab initio* calculations based on density functional theory. Volume effects during the impurities insertion have been studied. Pd, Ti, and Cr solutes were found to have the most effect on hydrogen dissolution energy, what explains hydrogen trapping on them.

Keywords: hydrogen adsorption, hydrogen traps, iron alloys, density functional theory, *ab initio* calculations, WIEN2k.

Mirzoev Alexandr Aminulaevich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, General and Theoretical Physics department, South Ural State University.

Мирзоев Александр Аминулаевич – профессор, доктор физико-математических наук, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет.
e-mail: mirzoev@physics.susu.ac.ru

Mirzaev Jhalal Aminulovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Physical Metallurgy and Solid State Physics department, South Ural State University.

Мирзаев Джалал Аминулович – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра физического металловедения и физики твердого тела, Южно-Уральский государственный университет.

Rakitin Maxim Sergeevich is a post-graduate student, General and Theoretical Physics department, South Ural State University.

Ракитин Максим Сергеевич – аспирант, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет.
e-mail: rms85@physics.susu.ac.ru