

Н.Н. ДЕГТЯРЕНКО, А.А. ПИСАРЕВ
Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

МОДЕЛИРОВАНИЕ АДСОРБИРОВАННОГО ВОДОРОДА НА ПОВЕРХНОСТИ ВОЛЬФРАМА

Методом DFT проведено исследование структурных, энергетических и фононных свойств системы: адсорбированный водород – поверхность вольфрама. Рассмотрены различные структуры монослоя водорода на поверхностях (100) и (110) вольфрама. Рассчитано влияние степени покрытия Θ атомами водорода поверхности W на свойства системы, её энергетические и частотные характеристики, а также устойчивость. Показано, что при $\Theta \geq 2$ вероятны процессы нетермической десорбции молекул водорода и внедрения атомов водорода в подповерхностный слой вольфрама. Рассматривается влияние нулевых высокочастотных колебаний атомов водорода (ZPE) на их поверхностную диффузию.