

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Национальный исследовательский Томский политехнический университет  
Национальный исследовательский Томский государственный университет  
Томский государственный архитектурно-строительный университет  
Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники

## **ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ НАУК**

Сборник научных трудов  
XII Международной конференция студентов и молодых ученых

**21–24 апреля 2015 г.**

## **PROSPECTS OF FUNDAMENTAL SCIENCES DEVELOPMENT**

XII International Conference of students and young scientists

**21–24 April, 2015**

Томск 2015

УДК 50(063)  
ББК 20л0  
П27

**Перспективы развития фундаментальных наук** [Электронный П27 ресурс] : сборник трудов XII Международной конференция студентов и молодых ученых (Томск, 21–24 апреля 2015 г.) / Томский политехнический университет. – Томск : Изд-во Томского политехнического университета, 2015. – 1556 с.

ISBN 978-5-4387-0560-4

Сборник содержит труды участников XII Международной конференции студентов и молодых учёных «Перспективы развития фундаментальных наук». Включает доклады студентов и молодых ученых, представленные на секциях «Физика», «Химия», «Математика», «Биология и медицина», «Наноматериалы и нанотехнологии», «Технология», «Конкурс архитектурных работ», «IT-технологии и электроника».

Предназначен для студентов, аспирантов, молодых ученых, преподавателей в области естественных наук и высшей математики.

**УДК 50(063)**  
**ББК 20л0**

*Редакционная коллегия*

И.А. Курзина, доктор физико-математических наук, доцент ТПУ.  
Г.А. Воронова, кандидат химических наук, доцент ТПУ.  
С.А. Поробова, инженер ТГАСУ.

**ISBN 978-5-4387-0560-4**

© ФГАОУ ВО НИ ТПУ,  
электронный текст, 2015

## АДСОРБЦИЯ КИСЛОРОДА НА НИЗКОИНДЕКСНЫХ ПОВЕРХНОСТЯХ $TiAl_3$

А.М. Латышев<sup>1</sup>, А.В. Бакулин<sup>1,2</sup>, С.Е. Кулькова<sup>1,2</sup>

Научный руководитель: профессор, д.ф.м.н. С.Е. Кулькова

<sup>1</sup> Национальный исследовательский Томский государственный университет,

Россия, г.Томск, пр. Ленина, 30, 634050

<sup>2</sup> Институт физики прочности и материаловедения СО РАН,

Россия, г.Томск, пр. Академический, 2/4, 634055

E-mail: [latvshev1992@mail.ru](mailto:latvshev1992@mail.ru)

## OXYGEN ADSORPTION ON $TiAl_3$ LOW-INDEX SURFACE

A.M. Latvshev, A.V. Bakulin, S.E. Kulkova

Scientific Supervisor: Prof., Dr. S.E. Kulkova

<sup>1</sup> Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

<sup>2</sup> Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS,

Russia, Tomsk, Akademicheskyy str., 2/4, 634055

E-mail: [latvshev1992@mail.ru](mailto:latvshev1992@mail.ru)

***Annotation.** Adsorption of oxygen atom on both (100) and (001) surfaces of  $TiAl_3$  alloy with  $D0_{22}$  structure are investigated by using the projector augmented wave method within the generalized gradient approximation for the exchange correlation functional. High symmetry positions such as hollow (H), bridge (B), top (T) and three fold-coordinated (F) for oxygen adsorption are considered. It was shown that  $H_{Al}$  position is the most preferable for O adsorption irrespective on (001) surface termination. In case of  $TiAl_3(100)$  surface the highest adsorption energy was found in the bridge B position between titanium and aluminum atoms.*

Сплавы на основе титана широко используются в современных отраслях промышленности, таких как аэрокосмическая, автомобильная, судостроительная и другие. Несмотря на то, что разработка титановых сплавов началось в конце 40-х годов XX века, до сих пор остается актуальной проблема низкой коррозионной стойкости таких сплавов при высоких температурах. В настоящее время очень перспективными считаются сплавы на основе Ti-Al. Наиболее изученным в настоящее время является сплав  $\gamma$ -TiAl, который обладает целым комплексом хороших механических свойств, среди которых необходимо отметить высокую температуру плавления, жаропрочность, низкую плотность и др. Экспериментальные исследования [1–2] показывают, что недостаточная коррозионная стойкость этого сплава при повышенных температурах может быть обусловлена ростом смешанных оксидных слоев титана и алюминия на его поверхности. Легирование сплава  $\gamma$ -TiAl и изменение его химического состава может влиять на механизм окисления. Например, сплав  $TiAl_3$  имеет наибольшую коррозионную стойкость из всех алюминидов титана [3]. Цель настоящей работы заключалась в изучении механизмов адсорбции кислорода на низкоиндексных поверхностях сплава  $TiAl_3$ .

Расчеты атомной и электронной структуры объемного сплава  $TiAl_3$ , а также его низко-индексных поверхностей проводились методом проекционных присоединенных волн [4], реализованным программным кодом VASP [5] с обобщенным градиентным приближением [6] для обменно-корреляционного функционала. Максимальная энергия базисного набора плоских волн была равна 600

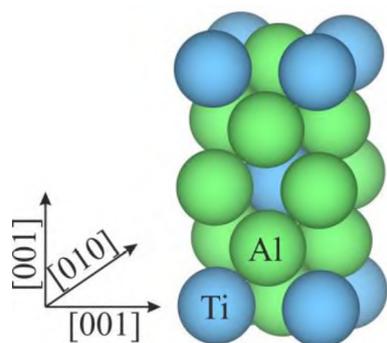


Рис. 1. Атомная структура  $TiAl_3$

эВ. Для расчета поверхностей использовался подход многослойных пленок, содержащих 8-9 атомных слоев сплава, разделенных промежутком вакуума не менее 12 Å. Использовалась модель несимметричных пленок, при этом атомы трех слоев с одной стороны поверхности фиксировались, тогда как положения атомов остальных слоев сплава оптимизировались до достижения сил на атомах  $\sim 0.01$  eV/Å.

Сплав  $TiAl_3$  имеет тетрагональную структуру  $D0_{22}$  (рис. 1), поэтому для поверхности (001) возможно два типа окончания.

Сплав может заканчиваться слоем алюминия  $TiAl_3(001)_{Al}$  или слоем, содержащим атомы титана и алюминия в равных пропорциях  $TiAl_3(001)_{TiAl}$ . Поверхность с ориентацией (100) имеет стехиометрический состав. На рис. 2 показаны позиции, в которых изучалась адсорбция кислорода.

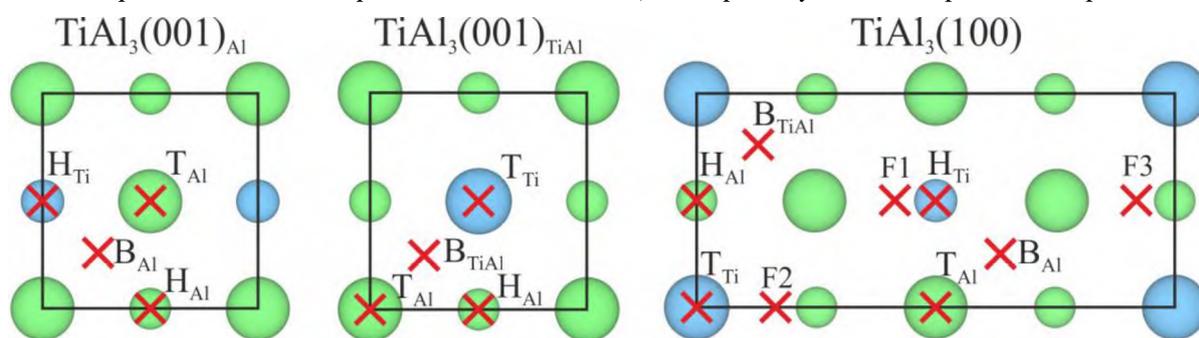


Рис. 2. Позиции адсорбции на исследованных поверхностях (001) и (100) сплава  $TiAl_3$ .

В таблице 1 приведены рассчитанные энергии адсорбции для изученных позиций на поверхностях (001) и (100) сплава  $TiAl_3$ . Видно, что независимо от окончания на поверхности (001) кислород предпочитает адсорбироваться в  $H_{Al}$ -позиции над атомом алюминия второго слоя. Напомним, что на поверхности (001) сплава  $\gamma$ - $TiAl$  наибольшая энергия адсорбции была найдена для H-позиции на титановом окончании и для B-позиции на поверхности  $TiAl(001)_{Al}$  [7], тогда как на  $TiAl(100)$   $H_{Al}$ -позиция была несколько более выгодной по сравнению с  $H_{Ti}$ . Что касается поверхности  $TiAl_3(100)$ , то в этом случае наиболее предпочтительной для кислорода найдена мостиковая позиция между поверхностными атомами титана и алюминия. Меньшая на 0,28 эВ энергия адсорбции найдена в F2-позиции, когда кислород адсорбируется в центре треугольника, образованного двумя атомами алюминия и атомом титана. Таким образом, тенденции в предпочтительности позиций адсорбции, найденные для  $\gamma$ - $TiAl$ , в целом остаются справедливыми и для сплава  $TiAl_3$ .

Таблица 1

Энергия адсорбции кислорода (в эВ) на поверхностях (001) и (100) сплава  $TiAl_3$

Позиция	$H_{Al}$	$H_{Ti}$	$B_{Al}$	$B_{Ti-Al}$	$T_{Al}$	$T_{Ti}$	F1	F2	F3
$TiAl_3(001)_{Al}$	<b>4,62</b>	3,79	$\rightarrow H_{Al}$	–	2,20	–	–	–	–
$TiAl_3(001)_{TiAl}$	<b>4,71</b>	–	–	4,60	2,87	3,78	–	–	–
$TiAl_3(100)$	4,28	4,11	$\rightarrow F2$	<b>4,99</b>	2,36	3,53	4,30	4,71	4,66

На рис. 3 представлены локальные плотности электронных состояний (ПЭС) адсорбированного кислорода, а также поверхностных и подповерхностных атомов для наиболее предпочтительных позиций

адсорбции. Отметим, что  $s$ -состояния расположены при энергиях  $\sim -19$  эВ и не показаны на рис. 3. Видно, что на поверхности (001) адсорбция кислорода в  $H_{Al}$ -позиции приводит к значительному изменению ПЭС поверхностных атомов. Причем на смешанном окончании ПЭС атомов алюминия изменяют сильнее, чем атомов титана. Отметим, что на чистой поверхности (001) независимо от ее окончания состояния алюминия расположены в широком интервале энергий от -10 эВ, тогда как состояния титана локализованы в узкой области энергий вблизи уровня Ферми. Это приводит к тому, что состояния алюминия значительно легче вовлекают во взаимодействие с  $p$ -состояниями кислорода. Изменение ПЭС подповерхностных атомов выражено значительно слабее, поскольку их взаимодействие с кислородом не прямое, а через гибридизацию с состояниями поверхностных атомов.

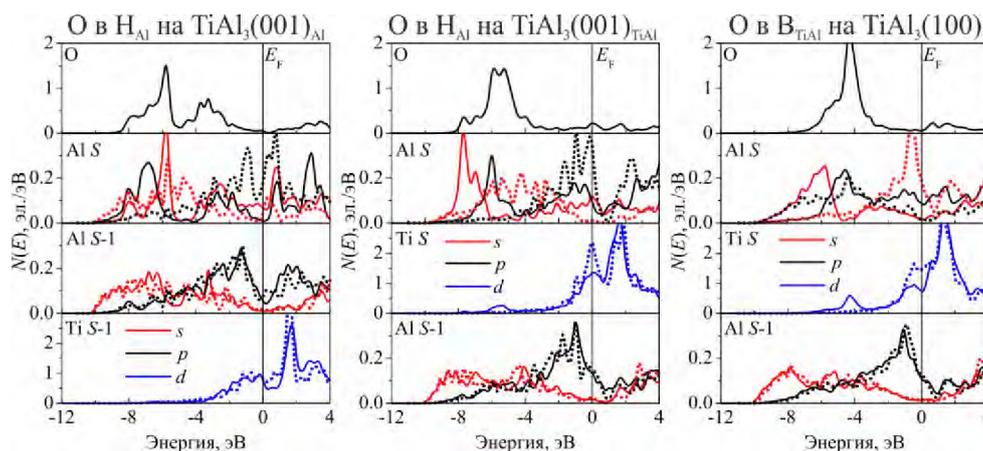


Рис. 3. Локальные ПЭС кислорода, а также поверхностных (S) и подповерхностных (S-1) атомов для предпочтительных позиций адсорбции. Точками показаны состояния атомов чистой поверхности.

Предпочтительность  $V_{TiAl}$ -позиции на поверхности  $TiAl_3(100)$  может быть связана с тем обстоятельством, что в этой позиции кислород может образовывать устойчивую связь как с атомами титана, так и атомами алюминия. В этом случае длина связи O–Ti и O–Al на 0,21 Å и 0,43 Å меньше, чем при адсорбции кислорода в  $H_{Al}$ -позиции, соответственно. Это приводит к более сильной гибридизации состояний кислорода с состояниями металлов и, как следствие, к большей энергии адсорбции.

*Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 14-02-91150\_ГФЕН.*

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Lang C., Schütze M. TEM investigation of the early stages of TiAl oxidation // Oxidation of Metals. – 1996. – V. 46. – P. 255–285.
- Schmitz-Niederer M., Schütze M. The Oxidation Behavior of Several Ti-Al Alloys at 900°C in Air // Oxidation of Metals. – 1999. – V. 52. – P. 225–240.
- Я. Полмеар. Легкие сплавы. От традиционных до нанокристаллов. – М.: Техносфера, 2008. – 464 с.
- Blöchl P.E. Projector augmented-wave method // Phys. Rev. B. – 1994. – V. 50. – P. 17953–17979.
- Kresse G., Hafner J. Ab initio molecular dynamics for liquid metals // Phys. Rev. B. – 1993. – V. 47. – P. 558–561.
- Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple // Phys. Rev. Lett. – 1996. – V. 77. – P. 3865–3868.
- Kulkova S.E., Bakulin A.V., Hu Q.M., Yang R. Adsorption and diffusion of oxygen on  $\gamma$ -TiAl(001) and (100) surfaces // Comp. Mat. Science. – 2015. – V. 97. – P. 55–63.