**Расчет поверхностной энергии связи в сплавах Ni и Pd различных концентраций с помощью теории функционала плотности**

***Москаленко С.С.*1*, Мелкозерова Ю.А.* 2, Гайнуллин И.К.3**

1*аспирант,* 2*аспирант, 3к.ф.-м.н., доцент*

*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,   
физический факультет, Москва, Россия  
E–mail*: ivan.gainullin@physics.msu.ru

Энергия поверхностной связи является важным параметром для физики твердого тела. Она определяет энергию, необходимую для передачи атому поверхности для его удаления с выше упомянутой поверхности. Поэтому для таких задач как распыление и рассеяние важно знать ее значение. Нахождению энергии поверхностной связи посвящено немало теоретических работ [1-3], в том числе в которых используется расчетный пакет VASP, основанный на теории функционала плотности.

Особое внимание для физической электроники привлекают сплавы никеля и палладия. Сплавы Ni-Pd более эффективны, чем чистые металлы, во многих применениях, например в электрохимии, микроэлектронике, катализе. Они интенсивно изучаются экспериментально и теоретически. И хотя такой материал как сплав NiPd давно используется и изучается в самых разных областях физики, значение энергии связи для разных концентраций Ni и Pd в сплаве до сих пор неизвестно.

В работе с помощью теории функционала плотности были рассчитаны энергии поверхностной связи для чистых металлов Ni и Pd, а также их сплавов различных концентраций. Для чистых металлов были получены значения равные 5,32 эВ и 4,65 эВ соответственно, что является хорошей точностью для первопринципных расчетов.

В работе также были произведены расчеты энергии поверхностной связи для разных конфигураций сплавов NiPd с концентрацией никеля и палладия 66%, 50%, 33%, 1,85%. Для каждого типа решеток были произведены расчеты как для энергии поверхностной связи Ni, так и для Pd. Моделировалось несколько видов решеток. При расчете энергии поверхностной связи Ni в кристаллической решетке Pd и энергии связи Pd в кристаллической решетке Ni значения энергии связи оказались практически одинаковыми с значениями энергии связи для чистых металлов.

Также была рассчитана относительная энергия образования поверхности. Значения относительных энергий образования поверхности лежат между значений энергий для чистых металлов, что хорошо согласуется с представлениями о физике поверхности.

**Литература**

1. Gyoeroek M. et al. Surface binding energies of beryllium/tungsten alloys // Journal of Nuclear Materials. – 2016. – Т. 472. – С. 76-81.
2. Tran R. et al. Surface energies of elemental crystals //Scientific data. – 2016. – Т. 3. – №. 1. – С. 1-13.
3. Wang J., Wang S. Q. Surface energy and work function of fcc and bcc crystals: Density functional study // Surface science. – 2014. – Т. 630. – С. 216-224.