ОСОБЕННОСТИ ПОВЕДЕНИЯ ВОДОРОДНОЙ ПОДСИСТЕМЫ В ПАЛЛАДИИ ПРИ ЛОКАЛЬНОМ ВОЗДЕЙСТВИИ

Л.Ю. Немирович-Данченко1,2,\*), Л.А. Святкин1), И.П.Чернов1)

1) НИ ТПУ, г. Томск, Россия

2) ТУСУР, г. Томск, Россия

\*) e-mail: ndlyu@tpu.ru

Радиационно-стимулированная миграция водорода в металлах и сплавах под действием гамма–квантов и нейтронов изучаются уже многие годы в связи с проблемой водородного охрупчивания материалов. Экспериментальные результаты свидетельствуют, что изотопы водорода, занимая междоузельные положения в решетке металла, образует собственную водородную подсистему. Энергия, вносимая в процессе радиационного воздействия, аккумулируется водородной подсистемой, в результате чего атомы изотопов водорода приобретают существенно большую энергию, по сравнению с атомами матрицы /1/. Целью настоящей работы является выявление особенностей реакции водородной подрешетки в системе Pd-H на локальное смещение атома водорода из состояния равновесия в междоузлии.

Все расчеты выполнялись в рамках теории функционала электронной плотности методом псевдопотенциала, реализованным в пакете программ ABINIT. В работе рассчитан перенос заряда по Бадеру и силы, действующие на атомы в системе Pd-H при локальном возбуждении ее водородной подрешетки. Установлено, что при смещении атома водорода из центра междоузлия имеет место перенос электронного заряда преимущественно к соседним атомам палладия и водорода.

ЛИТЕРАТУРА

1. Yu.I. Tyurin, V.S. Sypchenko, N.N. Nikitenkov, Hongru Zha, I.P. Chernov, // Int. J. Hydrogen Energy, 2019, Vol. 4, p. 20223.