ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ СИСТЕМЫ ПАЛЛАДИЙ-СЕРЕБРО-ВОДОРОД

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

Металлические мембраны из сплавов Pd широко используются для получения сверхчистого водорода. В чистом палладии при насыщении водородом происходит структурно-фазовый переход, способствующий водородному охрупчиванию мембран. Особый научный и практический интерес представляют сплавы палладия с серебром, в которых при их насыщении водородом фазовые переходы и, соответственно, охрупчивание не наблюдаются. В настоящей работе было изучено из первых принципов плотность электронных состояний и распределение электронной плотности, в частности, перенос заряда между атомами палладия, серебра и водорода в соединениях Pd1-*x*Ag*x*H*y*, где *x* и *y* принимают значения 0, 0,25, 0,50, 0,75 и 1,0. С этой целью были рассчитаны распределение электронной плотности, объёмы по методу Бадера, занимаемые атомами Н, Pd и Ag в соединениях Pd1-*x*Ag*x*H*y*, и электронные заряды в этих объёмах. Все расчеты выполнялись в рамках теории функционала электронной плотности методом псевдопотенциала, реализованным в пакете программ ABINIT.

Показано, что в рассмотренных соединениях Pd1-*x*Ag*x*Hy увеличение концентрации серебра *x* приводит к большему переносу электронного заряда от атомов серебра преимущественно к атомам водорода. Установлено, что с ростом концентрации серебра увеличиваются области с пониженной электронной плотностью между атомами (плотность электронов в этих областях меньше 0,02 электрон/Бор3), что указывает на ослабление металлической составляющей связей палладий-серебро и металл-водород. Выявлено, что в рассмотренных соединениях Pd1-*x*Ag*x*Hy в *d* зоне серебра в области энергий от 5,5 до 3 эВ ниже уровня Ферми присутствует повышенная плотность электронных *s* состояний водорода, что, по-видимому, и приводит к неустойчивости системы палладий-серебро-водород при высоких концентрациях водорода и серебра.