МЕХАНИЗМ ПЕРЕНОСА ВОЗМУЩЕНИЙ В ВОДОРОДНОЙ ПОДСИСТЕМЕ В СИСТЕМЕ ПАЛЛАДИЙ-ВОДОРОД

И.В. Богданов1,\*), Л.А. Святкин1),

Л.Ю. Немирович-Данченко1,2), И.П. Чернов1)

1) НИ ТПУ, г. Томск, Россия

2) ТУСУР, г. Томск, Россия

\*) e-mail: ivb34@tpu.ru

Согласно экспериментальным данным, атомы водорода в решётке палладия могут образовывать собственную подсистему, способную к накоплению энергии через возбуждение её радиационным воздействием с энергией ниже порога дефектообразования. Ранее в рамках теоретического исследования перераспределения валентной зарядовой плотности плотности в системе PdH при смещении одного из атомов H из равновесного положения в октаэдрическом междоузлии было показано, что возбуждение водородной подсистемы проявляется в виде воздействия на атомах H соседних со смещенным атомом сил, превышающих силы, действующие на атомы палладия, что однозначно является следствием перераспределения заряда на атомах системы. Однако, до сих пор оставался не ясен механизм переноса возмущений в водородной подсистеме. Целью данной работы является изучение на основе расчётов из первых принципов перераспределение плотности электронных состояний (ПЭС) и его влияния на характер связей H-H и H-Pd при локальном смещении атома водорода из равновесного положения в междоузлии в ГЦК решётке палладия.

Все расчеты выполнялись в рамках теории функционала плотности методом псевдопотенциала, реализованным в пакете программ ABINIT. В ходе работы рассчитаны ПЭС системы Pd-H, а также заселённость кристаллических орбиталей Гамильтона для связей между атомами H и Pd. Показано, что связь водорода с палладием преимущественно осуществляется за счет гибридизации *s* состояний H с *d*x2-y2 состояниями Pd. При смещении одного из атомов H эта связь упрочняется с ближайшим к нему атомом Pd за счет роста степени ее ковалентости. При этом связь этого атома Pd с другими атомами H соседними с ним ослабевает. В результате на этих атомах H и возникают силы, действующие в направлении от этого атома Pd.