

## ИЗМЕНЕНИЕ АТОМНО-ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ В СИСТЕМЕ Pd:H ПРИ АБСОРБЦИИ ВОДОРОДА

**И.И. Бардышев, Б.Ф. Ляхов, Ю.М. Полукаров**

*Учреждение Российской академии наук Институт физической химии  
и электрохимии им. А.Н.Фрумкина РАН*

*11999 Москва, Ленинский просп., д. 31, корп.4; e – mail: bardyshev@phyc.che.ac.ru*

Возросший в последнее время интерес к системам металл-водород охватывает широкий диапазон от фундаментальных до чисто прикладных проблем. Водород, введенный в металл, радикально изменяет его свойства. Среди переходных металлов наибольшей абсорбционной способностью обладает палладий, в котором растворяется до 900 объемов водорода на один объем Pd. Растворение в этом металле водорода приводит к целому ряду структурных изменений, влияющих на физико-химические и механические свойства материала.

Методом аннигиляции позитронов исследована атомно-электронная структура электрохимически наводороженного палладия. Измерены кривые угловая корреляции аннигиляционного излучения (УКАИ, 1D-геометрия) в исходном образце Pd, электрохимически наводороженном Pd и затем разводороженном Pd. Определены следующие характеристики образцов: энергия Ферми  $E_F$ , концентрация свободных электронов в металле  $N/V$ , полуширина гауссовой компоненты (обусловленной аннигиляцией позитронов на ионном остове металла), связанная с плотностью упаковки атомов в кристаллической решетке, а также интенсивность гауссовой компоненты в кривых УКАИ (GF), зависящая от концентрации вакансионных дефектов.

Обнаружено, что в наводороженном образце Pd (концентрация введенного водорода  $1.33 \cdot 10^{22}$  ат/см<sup>3</sup>) наблюдается значительное увеличение концентрации свободных электронов по сравнению с исходным образцом: от  $N/V = 4,6 \cdot 10^{22}$  см<sup>-3</sup> до  $N/V = 6,0 \cdot 10^{22}$  см<sup>-3</sup>. Этот факт указывает на то, что практически все введенные атомы водорода отдают свой электрон в электронный ансамбль свободных электронов металла и, следовательно, находятся в ионизированном состоянии. Одновременно наблюдается уменьшение полуширины гауссиана в кривых УКАИ, что свидетельствует о некотором разрыхлении кристаллической решетки Pd при наводороживании. При этом количество вакансионных дефектов (GF) увеличивается.

После выдержки наводороженного образца в комнатных условиях в течении 15 суток наблюдается резкое уменьшение концентрации свободных электронов (до  $3,5 \cdot 10^{22}$  см<sup>-3</sup>), дальнейшее разрыхление решетки и уменьшение концентрации вакансионных дефектов. В результате электрохимического разводороживания образцов аннигиляционные характеристики возвращаются к значениям для исходного образца.