

## ВОДОРОДНЫЕ БИКОМПЛЕКСИИ И КРАУДИОНЫ ВНЕДРЕНИЯ В КРИСТАЛЛАХ. РАСТВОРИМОСТЬ ВОДОРОДА

С.Ю.Загинайченко, З.А.Матысина, Д.В.Щур, В.К.Пишук

Институт проблем материаловедения НАН Украины, Киев, Украина  
Днепропетровский государственный университет,  
Днепропетровск, Украина

Институт водородной и солнечной энергетики УАННП, Киев, Украина

При большой концентрации водорода в кристаллах (например, в накопителях) может оказаться энергетически выгодным распределение атомов водорода в междоузлиях разного типа: октаэдрических, тетраэдрических, триангулярных, в узлах кристаллической решетки и, вследствие этого, формирование термодинамически равновесных водородных комплексов, таких, например, как разного типа гантели, линейные и плоские тройные и четвертные комплексы, краудионы. В работе выполнено теоретическое исследование энергетического состояния кристалла при формировании в нем бикомплексов и краудионов внедрения из водородных атомов. Изучен бинарный неупорядоченный сплав с ГЦК решеткой. Расчеты выполнены на базе молекулярно-кинетической теории в упрощенной модели кристалла. Кристаллическая решетка принималась геометрически идеальной. Взаимодействие атомов учитывалось в первой координационной сфере. Релаксация решетки и корреляция в замещении узлов и междоузлий соответствующими атомами во внимание не принималась.

Обоснована энергетическая выгодность образования водородных комплексов. Рассчитана растворимость водорода с учетом образования комплексов, построены графики температурной зависимости растворимости водорода. Показано, что образование водородных комплексов увеличивает растворимость водорода.

Результаты теории сопоставлены с экспериментальными данными по растворимости водорода в сплавах Fe-Ni, Fe-V, Pd-Ni, Pd-Pt.

Литература

1. Schur DV, Zaginaichenko SYu, Adejev VM, Voitovich VB, Lyashenko AA, Trefilov VI, Phase transformations in titanium hydrides, International journal of hydrogen energy, 21, 11, 1121-1124, 1996, Pergamon
2. Matysina ZA, Pogorelova OS, Zaginaichenko SYu, Schur DV, The surface energy of crystalline CuZn and FeAl alloys, Journal of Physics and Chemistry of Solids, 56, 1, 9-14, 1995, Elsevier
3. Isayev KB, Schur DV, Study of thermophysical properties of a metal-hydrogen system, International journal of hydrogen energy, 21, 11, 1129-1132, 1996, Pergamon
4. Schur DV, Lavrenko VA, Adejev VM, Kirjakova IE, Studies of the hydride formation mechanism in metals, International journal of hydrogen energy, 19, 3, 265-268, 1994, Elsevier
5. Matysina ZA, Zaginaichenko SYu, Schur DV, Hydrogen solubility in alloys under pressure, International journal of hydrogen energy, 21, 11, 1085-1089, 1996, Pergamon
6. Schur DV, Lyashenko AA, Adejev VM, Voitovich VB, Zaginaichenko S Yu, Niobium as a construction material for a hydrogen energy system, International journal of hydrogen energy, 20, 5, 405-407, 1995, Elsevier