

УДК 544.6.018

ЗАВИСИМОСТЬ ПРОЦЕССОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МЕТАЛЛОВ С ВОДОРОДОМ ОТ СТРУКТУРЫ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Звягинцева А.В.

*Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия
E-mail: zvygincevaav@mail.ru*

В работе показано взаимодействие водорода с металлами с различной степенью упорядоченности структуры. Проиллюстрирована возможность использования металлов и сплавов для безопасного хранения водорода в гидридной форме. Представлены экспериментальные результаты поведения водорода в сплавах на основе никеля при его легировании атомами бора. Электронномикроскопическое исследование структуры показало, что при легировании никелевых покрытий бором до 1% приводит к увеличению дисперсности получаемых структур и формированию мелкокристаллической структуры. Представлена взаимосвязь структуры, наводороживания и кинетических данных, характеризующих скорость электрокристаллизации, в зависимости от содержания бора в Ni-B-H системах.

Ключевые слова система Ni-B-H, водород, гистограмма, микроструктура, дефекты структуры, парциальная плотность тока, размер зерна, содержание бора.

ВВЕДЕНИЕ

Структура, удовлетворяющая условиям хранения водорода в гидридной форме, должна отвечать следующим основным требованиям:

- 1) иметь высокую степень развития поверхности для обеспечения необходимого количества водорода, экстрагируемого из объема металла;
- 2) иметь достаточно высокую плотность дефектов в единице объема материала;
- 3) иметь минимальное количество закрытых каналов, не имеющих контакта с атмосферой.

Кроме того, используемые материалы должны легко взаимодействовать с водородом в условиях осуществления электрохимической реакции.

В теории водородного взаимодействия водорода с металлами [1–4] существует понятие о наличии “водородного пробела” для переходных элементов четвёртого периода. В то же время в ряде работ показано [5, 6], что при электрохимическом образовании металлов становится возможным существование гидридной фазы в структуре катодно-восстановленного металла. Поэтому допустимо утверждать, что вероятность образования гидридных соединений для такого способа формирования металла возрастает по причинам наличия атомарного водорода, возникающего на одной из возможных стадий суммарного электрохимического процесса и наличия в структуре металла зон с высокими энергетическими потенциалами (дефекты структуры).

Анализируя положение элементов в системе Д.И. Менделеева можно сделать заключение, что некоторые переходные металлы, например, Ni, Cr, Fe, полученные электрохимическим методом, могут взаимодействовать с водородом при их катодном восстановлении. Однако взаимосвязь со структурой кристаллической решетки элементов, взаимодействующих с водородом, пока не выявлена. Тем не менее, взаимодействие водорода со структурой металлов, как правило, осуществляется наиболее эффективно по дефектам структуры. Вероятно, что дефекты структуры (границы зерен, выходы дислокаций на поверхность и другие) имеют, наиболее, высокий потенциал взаимодействия с водородом. Формирование дефектов структуры на катоде целесообразно при создании структур с высокой степенью аккумуляирования водорода.

В общем случае количество растворённого водорода в металле может быть определено из выражения:

$$V_{H_2} \equiv (m_{мет}/\rho_{ме}) \times N_A \quad (1)$$

$$V_{H_2} \equiv V_{ме} \times N_A \times k_{л} \times k_{д} \times k_{i} \quad (2)$$

где N_A – постоянная Авогадро; $k_{л}$ – коэффициент, зависящий от воздействия внешних полей на процесс образования соединений Me–H; $k_{д}$ – коэффициент дефектов, учитывающий число образуемых дефектов на единицу объёма; k_{i} – коэффициент пересчёта объёма металла в атомную массу в соответствии с числом N_A (сколько грамм - атомов занимает данный объём металла).

Воспользоваться такой формулой для аналитического определения количества растворённого водорода довольно сложно. В то же время она отражает всю феноменологию процесса взаимодействия водорода с металлом при его электрохимическом восстановлении. Ранее в работе [7] показано, что содержание водорода в покрытиях электрохимического типа на основе сплава Ni-B зависит от ряда факторов: $V_{H_2} = f(C_{борсодержащей\ добавки}, i_k, t_{эл-та}, \tau_{эл-за})$. Детальное исследование этого процесса показало, что концентрация бора в системе является одним из определяющих параметров, оказывающих влияние на содержание водорода в электролитическом сплаве Ni-B.

Целью данной работы являлось изучение влияния бора на структурные изменения и процессы взаимодействия с водородом в электрохимических системах на основе никеля.

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Содержание водорода определяли методом вакуумной экстракции. Образец помещают в кварцевую камеру в которой создается вакуум 10^{-5} мм. рт. ст. с азотной ловушкой. Образец нагревается до температуры 500°C . По разности давлений до и после нагрева вычисляем объем водорода по формуле:

$$V_{H_2} = 205 \cdot \Delta P / m, \text{ см}^3 / 100 \text{ г} \quad (3)$$

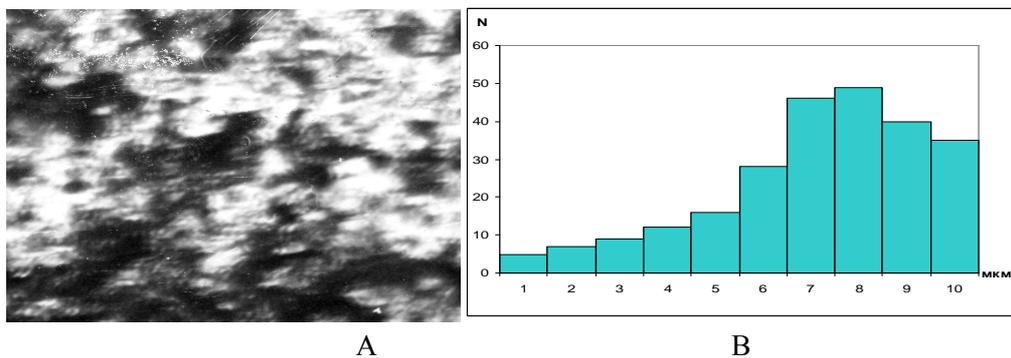
где ΔP – разность давлений, мм. рт. ст.; m – масса образца, г; коэффициент 205 определен конструктивными особенностями установки.

Исследование проводили в сульфатном электролите никелирования с использованием борсоединений класса высших полиэдрических боратов $\text{Na}_2\text{B}_{10}\text{H}_{10}$.

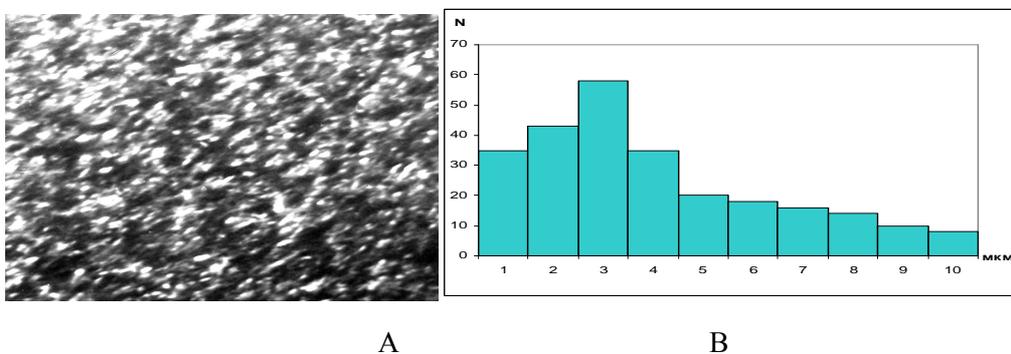
Режимы электролиза: плотность тока (i_k) 0,5–4,0 А/дм²; температура электролита ($t_{эл-та}$) 30–50 °С; рН – 3,5–4,5. Аноды – никель. Катоды – медь марки М-1. Содержание бора в системе Ni–В определяли спектрофотометрическим методом [7]. Исследование структуры систем Ni–В проводилось на электронном микроскопе УЭМВ – 100АК, а морфологии поверхности на микроскопе МИМ 7. Электрохимические измерения проводили потенциодинамическим методом (со скоростью развертки потенциала 4 мВ/с) на потенциостате П-5827Н. Катод медный, с рабочей поверхностью 0,75 см². В качестве электрода сравнения использовали хлорсеребряный электрод, а в качестве вспомогательного электрода – никель.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

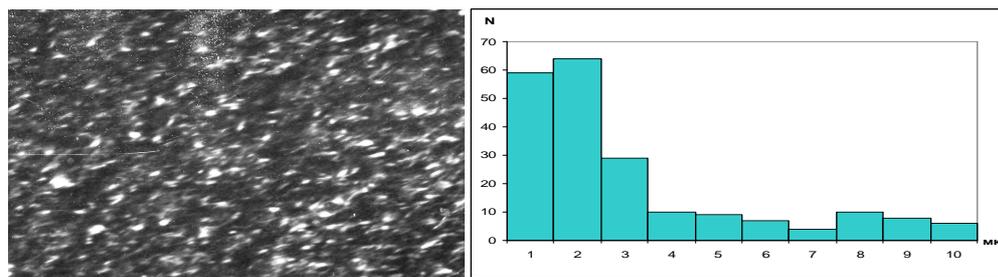
На рис.1. А и В показано влияние концентрации бора на структуру системы Ni–В–Н.



$C_B = 0,1 \%$, $i_k = 2 \text{ А/дм}^2$, $pH = 4,0$, $t_{эл-та} = 40 \text{ }^\circ\text{C}$



$C_B = 0,5\%$, $i_k = 2 \text{ А/дм}^2$, $pH = 4,0$, $t_{эл-та} = 40 \text{ }^\circ\text{C}$



А

В

$$C_B = 1\%, i_k = 2 \text{ A/дм}^2, \text{pH} = 4,0, t_{\text{эл-та}} = 40 \text{ }^\circ\text{C}$$

Рис. 1. Влияние концентрации бора на структуру системы Ni–B–H:
А - микроструктура покрытия; В – гистограмма

Из представленных фотографий микроструктуры и гистограмм, характеризующих распределение кристаллитов по размеру в зависимости от их количества, можно сделать вывод, что с увеличением концентрации борсодержащей добавки в электролите, и соответственно, содержания бора в системе никель–бор размер зерна имеет тенденцию к уменьшению. С увеличением концентрации бора в покрытии от 0,1 до 1% максимумы по размеру зерен сдвигаются влево на гистограмме в сторону меньших значений, и наблюдается формирование мелкокристаллической структуры.

При концентрации бора в покрытии 0,1 % число мелких зерен диаметром от 0,01 до 0,04 мкм составляет ~3,5%, средних диаметром от 0,04 до 0,08 мкм ~ 40,5% и крупных с диаметром более 0,08 мкм ~ 56% от общего числа зерен. При содержании бора в покрытии 0,1 % по массе число мелких зерен составляет 20 %, средних и крупных ~ 80 % от общего числа зерен.

При концентрации бора в покрытии 1% преобладает число мелких зерен. С диаметром до 0,04 мкм до 85%, а сумма средних диаметром от 0,04 до 0,08 мкм и крупных с диаметром более 0,04 мкм ~ 15% от общего числа зерен. Включение легирующего компонента бора в никель увеличивает дисперсность получаемых систем Ni–B–H. Это характерно для систем, осаждаемых с поверхностно активными добавками, в нашем случае борсодержащих соединений [7].

Микроструктурные исследования согласуются с кинетическими данными, характеризующими скорость электрокристаллизации, содержанием бора и водорода в системе Ni–B–H. Уменьшение размера кристаллитов в электрохимической системе Ni–B с увеличением борсодержащей добавки в электролите связано с особенностями адсорбционного механизма включения бора в никель.

Парциальные плотности токов выделения Ni–B и H₂, характеризующие скорость электровосстановления, в зависимости от концентрации борсодержащей добавки в электролите ($t_{\text{эл-та}} = 40 \text{ }^\circ\text{C}$, pH = 4,0, d = 8 мкм) представлены в таблице.

Таблица

Парциальные плотности токов выделения Ni-B^0 и H_2 в зависимости от концентрации борсодержащей добавки в электролите. Режимы электролиза: $i_k = 2 \text{ А/дм}^2$; $t_{\text{эл-та}} = 40 \text{ }^\circ\text{C}$; $\text{pH} = 4,0$; $d = 4 \text{ мкм}$

Концентрация борсодержащей добавки $\text{Na}_2\text{B}_{10}\text{H}_{10}$ в электролите, г/л	Содержание бора в системе Ni-B-H, %	Парциальные плотности токов, А/дм ²		ВТ_{H_2} , %	V_{H_2} см ³ /100 г
		$i_{\text{Ni-B}^0}$	i_{H_2}		
0,01	0,35	1,961	0,039	1,96	68
0,05	0,62	1,911	0,0891	4,35	80
0,1	0,97	1,857	0,143	7,05	113

Из анализа приведенных в таблице данных следует, что при увеличении концентрации борсодержащей добавки в электролите 0,01 до 0,10 г/л парциальная доля тока, приходящаяся на образование Ni-B^0 , уменьшается от $i_{\text{Ni-B}^0} = 1,961$ до $i_{\text{Ni-B}^0} = 1,857 \text{ А/дм}^2$, а на выделение H_2 увеличивается от $i_{\text{H}_2} = 0,039$ до $i_{\text{H}_2} = 0,143 \text{ А/дм}^2$ ($i_k = 2 \text{ А/дм}^2$; $\text{pH} = 4,0$; $t_{\text{эл-та}} = 40 \text{ }^\circ\text{C}$). На выделение H_2 расходуется от 1,96% ($C_B = 0,01 \text{ г/л}$) до 7,05% тока ($C_B = 0,10 \text{ г/л}$) при $i_k = 2 \text{ А/дм}^2$, что повышает вероятность включения водорода в систему. Выделяющийся водород адсорбируется при электрокристаллизации металла, а затем включается в металлическую матрицу, вызывая ее дополнительное наводороживание. Степень наводороживания систем Ni-B-H с ростом содержания бора от 0,35 до 0,97% увеличивается от 68 до 113 см³/100 г ($i_k = 2 \text{ А/дм}^2$; $\text{pH} = 4,0$; $t_{\text{эл-та}} = 40 \text{ }^\circ\text{C}$).

Исходя из данных поляризационных исследований доля тока, приходящаяся на образование Ni-B^0 , с повышением концентрации анионов борсодержащей добавки $\text{B}_{10}\text{H}_{10}^{2-}$ в электролите уменьшается, а на выделение H_2 увеличивается. Это свидетельствует о снижении скорости электровосстановления ионов Ni^{2+} и увеличении дисперсности формируемой системы. Согласно данным спектрофотометрического анализа состава образцов содержание бора в системе Ni-B-H возрастает, что можно объяснить повышением концентрации адсорбированных анионов борсодержащей добавки на поверхности катода вследствие увеличения соотношения концентрации анионов борсодержащей добавки к ионам Ni^{2+} в приэлектродном слое.

В данной работе представляло интерес сопоставить структурное изменение материала со способностью поглощать водород. В работе [9] рассмотрено влияние структуры на окклюдирующую способность металла. Эта способность оценивается с возможностью изменения дефектности структуры металла. Авторы монографии [9] показывают, что при переходе от чистого монокристалла к аморфной структуре увеличивается степень дефектности структуры и повышается вероятность к поглощению водорода. Для гипотетического металла такую взаимосвязь можно представить графической зависимостью (кривая 1), приведенной на рис. 2.

Закономерность изменения способности окклюзии водорода для электрохимических систем (металлов и сплавов) отражена на рис. 2 (кривая 2). Данная зависимость показана на основе изучения системы никель–бор–водород, для других электрохимических металлических структур эта зависимость может иметь отклонения, поскольку распределение по размеру отдельных кристаллографических образований не имеет четкой определенности для металлов и сплавов, полученных из водных растворов электролитов.



Рис. 2. Зависимость степени поглощения водорода от структуры металла:
1 – гипотетический металл; 2 – электрохимическая система (Ni–B–H)

При введении определенной концентрации бора наблюдается увеличение экстрагируемого водорода из образца, определяемое методом вакуумной экстракции. С другой стороны, введение бора способствует формированию неявно выраженной кристаллической структуры с переходом к аморфной. Необходимо отметить, что «бесконечно» вводить аморфотизатор – бор в структуру электролитического никеля невозможно. При достижении критической концентрации бора существование данной системы становится проблематичным в монолитном состоянии, наблюдается переход к порошковому виду. Наблюдаемое относительное уменьшение определяемого водорода в таких структурах, очевидно, связано с ограниченными возможностями метода определения – вакуумной экстракции. Другой причиной может быть образование водородных ловушек (закрытых коллекторов, извлечение водорода из которых методом вакуумной экстракции невозможно) в аморфных структурах. Для точного определения водорода в аморфных структурах, имеющих развитую межзеренную поверхность, необходимо применять другие методы определения водорода, например вакуумной плавки. Кроме этого, следует иметь в виду, что при повышении концентрации бора выше 3% (вес.) в сплаве Ni–B [4] может привести к его деструкции и снизить температуру диффузии до пределов сопоставимых с комнатными температурами. Это в свою очередь может привести к свободному течению водорода из структуры системы Ni–B–H.

Совместное осаждение с никелем уже небольших количеств бора (6 ат. %) из растворов декагидроборатов натрия приводит к изменению характера возникновения и роста частиц, а также плотности их распределения. В отличие от чистого никеля особенностью формирования систем никель-бор является то, что скорость возникновения зародышей превалирует над скоростью их роста, и образование новых зерен идет непрерывно по мере пассивирования поверхности растущего осадка бором. Это вызывает уменьшение размера образующихся кристаллитов и увеличение их концентрации на поверхности. С одной стороны это свидетельствует о возможности формирования структур с наибольшим числом дефектов в единицу объема металла за счет наличия в них структурных и примесных ловушек. С другой стороны, введение бора способствует формированию неявно выраженной кристаллической структуры с переходом к аморфным структурам. Как известно металлы, находящиеся в аморфном состоянии аккумулируют ~ на 40% водорода больше, чем кристаллические структуры [6].

При электрокристаллизации никеля в присутствии бора формируются различные структурные дефекты, которые изменяют кинетику абсорбции водорода и его содержание в единице объема. Возможности электрохимических систем на основе никеля по обратимой сорбции водорода рассматривались с учетом полей напряжения, создаваемых структурными дефектами. Основными типами структурных дефектов являются краевые дислокации, вершины микротрещин и клиновые дисклинации. Атомы водорода взаимодействуют с полями напряжений перечисленных дефектов. Содержание водорода в единице объема металла увеличивается. При описании диффузионных процессов при наличии примесных атомов выбрана модельная система – цилиндрические оболочки (полые цилиндры) и рассмотрена диффузия атомов водорода через цилиндрическую оболочку с примесными и структурными ловушками в работе [10].

Для описания кинетики сегрегации водорода около структурного дефекта, если определяющий вклад в кинетику процесса дает градиент поля напряжений соответствующие зависимости, будут иметь следующий вид:

$$\begin{aligned} N_1(\tau) &= B_1 \tau^{2/3} && \text{(краевая дислокация)} \\ N_2(\tau) &= B_2 \tau^{4/5} && \text{(вершина микротрещины)} \\ N_3(\tau) &= B_3 \tau && \text{(клиновое дисклинация)} \end{aligned} \quad (4)$$

где $\tau = \frac{Dt}{r_0^2}$ – безразмерное время, B_1 , B_2 и B_3 - постоянные, зависящие от свойств

материала, r_0 - характерный размер области для исключения сингулярностей в потенциалах взаимодействия.

Величина $N(\tau)$ представляет собой зависимость от времени числа захваченных атомов водорода. Она пропорциональна квадрату характерного размера сегрегации атомов водорода на структурных дефектах. Приведенные соотношения показывают способность различных дефектов захватывать атомы водорода из твердого раствора. Клиновое дисклинация осуществляет этот процесс по линейному закону. Кинетика

водородных сегрегаций для вершины микротрещины и краевой дислокации протекает более медленно. Такой вывод позволяет предположить, что аккумуляция водорода в структуре электрохимической системы необходимо формировать структуры с оптимальным числом дефектов в единице объема металла.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. С увеличением концентрации бора в покрытии от 0,1 до 1% наблюдается формирование мелкокристаллической структуры. Исследования показали, что, варьируя содержанием примеси неметалла бора в электрохимической системе, можно формировать структуры, которые имеют наибольшее число дефектов в единице объема металла, и могут являться местами закрепления атомов водорода, что определяет их дальнейшее применения для аккумуляции водорода.
2. Дефекты структуры в электрохимических системах являются целесообразными при создании структур с высокой степенью аккумуляции водорода. Проведено исследование взаимосвязи изменения структуры материала с его способностью к поглощению водорода. Установлено, что введение бора в структуру электрохимического никеля способствует формированию неявно выраженной кристаллической структуры с переходом к аморфным структурам. Рассмотрены теоретические и практические аспекты возможности применения аморфных структур Ni–B–H в качестве накопителей водорода для хранения водорода в металлгидридной форме.
3. Проведено математическое моделирование взаимодействия атомов водорода со структурными ловушками. Под структурными ловушками понимают дефекты кристаллической решетки электрохимического никеля, легированного бором. Основными структурными ловушками являются краевые дислокации, вершины микротрещин и клиновые дисклинации. Определена кинетика захвата атомов водорода структурными ловушками.

Список литературы

1. Маккей К. Водородные соединения металлов. [Перевод с англ.] // Под ред. В.И. Михеевой. М.: Мир, 1968. 244 с.
2. Галактионова Н.А. Водород в металлах. М.: Metallurgy, 1967. 303 с.
3. Гельд П.В., Рябов Р.А., Мохрачева Л.П. Водород и физические свойства металлов и сплавов. Гидриды переходных металлов. М.: Наука, 1985. 232 с.
4. Oudriss A., Creus J., Bouhattate J., Conforto E., Berziou C., Savall C., Feaugas X. Grain size and grain-boundary effects on diffusion and trapping of hydrogen in pure nickel. Acta Materialia, – 2012. – № 60. – P. 6814–6828.
5. Поветкин В.В., Ковенский И.М. // Структура электролитических покрытий. М.: Metallurgy, 1989. 136 с.
6. Судзуки К., Фудзимори Х., Хасимото К. Аморфные металлы // Под ред. Ц. Масумото. [Пер. с японского Е.И. Поляка // Под ред. И.Б. Кекало]. М.: Metallurgy, 1987 г. 328 с.
7. Zvyagintseva A.V. Interaction peculiarities of hydrogen and Ni–B galvanic alloys / A.V. Zvyagintseva // Carbon Nanomaterials in Clean Energy Hydrogen Systems. Springer, 2008. – P. 437–442.
8. Звягинцева А.В., Фаличева А.И. Электролит для электрохимического осаждения функциональных

- покрытий Ni–В. Пат. № 2124072 Россия. Заявка №93036355/02. Опубл. 27.12.98. Бюл. № 36.
9. Бекман И.Н. Феноменологическое описание диффузии в дефектных средах // Под ред. А.П. Захарова. М.: Наука, 1987. 296 с.
10. Власов Н.М. / Н.М. Власов, А.В. Звягинцева. // Математическое моделирование водородной проницаемости металлов. Воронеж: ВГТУ, 2012. 247 с.

Звягинцева А.В. Залежність процесів взаємодії металів з воднем від структури електрохімічних систем / А.В. Звягинцева // Вчені записки Таврійського національного університету ім. В.І. Вернадського. Серія „Біологія, хімія”. – 2013. – Т. 26 (65), № 4. – С. 259-269.

У роботі показано взаємодію водню з металами з різним ступенем впорядкованості структури. Проілюстрована можливість використання металів і сплавів для безпечного зберігання водню в гідридній формі. Представлені експериментальні результати поведінки водню в сплавах на основі нікелю при його легуванні атомами бору. Електронномікроскопічне дослідження структури показало, що при легуванні нікелевих покриттів бором до 1% призводить до збільшення дисперсності одержуваних структур і формуванню дрібнокристалічної структури. Представлен взаємозв'язок структури, наводнювання і кінетичних даних, що характеризують швидкість електрокрісталізації, в залежності від вмісту бору в Ni-ВН системах.

Ключові слова: система Ni-ВН, водень, гістограма, мікроструктура, дефекти структури, парціальна щільність струму, розмір зерна, вміст бору.

THE DEPENDENCE OF THE PROCESSES OF INTERACTION OF METALS WITH HYDROGEN FROM THE STRUCTURE OF ELECTROCHEMICAL SYSTEMS

Zvyagintseva A.V.

*Voronezh state technical University, Voronezh, Russia
E-mail: zvygincevaav@mail.ru*

The work shows the interaction of hydrogen with metals with varying degrees of regularity of the structure. Illustrated possibility of the use of metals and alloys for the safe storage of hydrogen in hydride form. Structure satisfying the conditions of storage of hydrogen in hydride form must meet the following basic requirements:

- 1) have a high degree of surface development, to ensure the necessary amount of hydrogen extracted from volume of the metal;
- 2) have a fairly high density of defects per unit volume of the material;
- 3) have a minimum number of closed channels that don't have contact with the atmosphere.

Besides the used materials must interact easily with hydrogen in the conditions of electrochemical reaction.

According phenomenological theory of hydrogen diffusion in metals in the presence of hydrogen «traps» in the structure of metal hampering the full extraction of hydrogen from the drive. Therefore, to effectively use the battery hydrogen is necessary to have in the structure of metal transport channels of molecular hydrogen. Generated channels on its geometry to provide optimal reduction of the produced gas.

Form electrochemical system of homogeneous metal for use as a drive is not possible, therefore, were conducted experimental research on the formation of structures of various

materials. According to the Auger spectral analysis of the investigated electrochemical system is a consisting of three components, such as Ni-B-H with different degree of filling of intermediate layers of boron atoms. We have studied the distribution of boron in layers alloy Ni-B and content of boron and hydrogen in the coverage volume of the layer thickness at constant other parameters electrolysis (i_c , pH, $t_{el-lyte}$, C_{boron} containing additives). The most enriched boron layers close to the base cover.

The study was performed in soleplate nickel ling electrolytes using boron containing class higher polyhedral borates $Na_2B_{10}H_{10}$. Hydrogen content was determined by the vacuum extraction method.

Experimental results are presented on the behavior of hydrogen in nickel-based alloys in his alloying atoms of boron. Electron microscope study of patterns when alloying with nickel coating boron up to 1% (weight) increases the dispersion of the obtained structures and the formation of fine-crystalline structure. The interrelation of structure and hydrogen pickup and kinetic data, characterizing the rate of electrocrystallisation, depending on the content of boron in Ni-B-H systems. The degree of hydrogen systems Ni-B-H with increasing content of boron from 0.35 to 0.97% increase from 68 to 113 $cm^3/100 g$ ($i_c = 2 A/dm^2$; pH = 4,0; $t_{el-lyte} = 40$ °C).

The share of current attributable to education Ni-B⁰, decreases from the $i_{Ni-B}^0 = 1,961$ to $i_{Ni-B}^0 = 1,857 A/dm^2$, and the allocation of H₂ increases from $i_{H_2} = 0,039$ to $i_{H_2} = 0,143 A/dm^2$ (in the same modes of electrolysis) with increasing concentration of anions boron additives $B_{10}H_{10}^{2-}$ in the electrolyte. This indicates a reduction in the speed of electroreduction of ions Ni²⁺ and increase the dispersion of the system being formed. Studies have shown that, by varying the content of impurities nonmetal boron in the electrochemical system, you can build structures which have the greatest number of defects per unit volume of the metal, and can be the places of the fastening of hydrogen atoms that determine their further applications for hydrogen storage.

Justified by the claim that structural defects in electrochemical systems are useful when creating structures with a high degree of hydrogen accumulation. Conducted a study of interrelation of changes of the structure of the material with its ability to absorb hydrogen. It is established that introduction of boron in the structure of electrochemical nickel contributes to the formation of an implicit crystal structure with the transition to an amorphous structure. Theoretical and practical aspects of the possibility of application of amorphous structures Ni-B-H storage of hydrogen for hydrogen storage in metal hydride form.

Mathematical modeling of the interaction of atoms of hydrogen with the structural traps. Structural traps understand lattice defects electrochemical nickel, doped with boron. The main structural traps are edge dislocations, the tops of micro cracks and wedge declination. Defined kinetics capture hydrogen atoms structural traps.

Keywords: system Ni-B-H, hydrogen, histogram, microstructure, structural defects, and partial current density, grain size, boron content

References

1. McKay K., Hydrogen compounds of metals, 244 p. («Mir», Moscow, 1968).
2. Galaktionova N.A., Hydrogen in metals, 303 p.(«metallurgy», Moscow, 1967).

3. Held P.V., Ryabov R.A., Mohracheva L.P., Hydrogen and physical properties of metals and alloys, 232 p. ("Nauka", Moscow, 1985).
4. Oudriss A., Creus J., Bouhattate J., Conforto E., Berziou C., Savall C., Feaugas X., Grain size and grain-boundary effects on diffusion and trapping of hydrogen in pure nickel, Acta Materialia, **60**, 6814 (2012).
5. Povetkin V.V., Kovenskiy I.M., Structure of the electrolytic coatings, 136 p. ("Metallurgiya", Moscow, 1989).
6. Suzuki K., Fudzimory H., Hashimoto K., Amorphous metals, 328 p. ("Metallurgiya", Moscow, 1987).
7. Zvyagintseva A.V., Interaction peculiarities of hydrogen and Ni-B galvanic alloys in: Carbon Nanomaterials in Clean Energy Hydrogen Systems, 437–442, (Springer, 2008).
8. Zvyagintseva A.V., Falicheva A.I., Electrolyte for electrochemical deposition of functional coatings Ni-B., Pat. № 2124072 Russia. Application № 93036355/02. Publ. 27.12.98. Bul. № 36.
9. Beckman I.N., Phenomenological description of diffusion in defective media, 296 p. ("Nauka", Moscow, 1987).
10. Vlasov N.M., Zvyagintseva A.V., Mathematical modeling of hydrogen permeability of metals, 247 p. (VSTU, Voronezh, 2012).

Поступила в редакцию 21.11.2013 г.