



MÖSSBAUER STUDY OF THE α -PHASE OF THE Ta-H SYSTEM

A. Heidemann, G. Kaindl, D. Salomon, G. Wortmann

► To cite this version:

A. Heidemann, G. Kaindl, D. Salomon, G. Wortmann. MÖSSBAUER STUDY OF THE α -PHASE OF THE Ta-H SYSTEM. Journal de Physique Colloques, 1974, 35 (C6), pp.C6-515-C6-515. 10.1051/jphyscol:19746108 . jpa-00215719

HAL Id: jpa-00215719

<https://hal.science/jpa-00215719>

Submitted on 4 Feb 2008

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

MÖSSBAUER STUDY OF THE α -PHASE OF THE Ta-H SYSTEM

A. HEIDEMANN, G. KAINDL (*), D. SALOMON and G. WORTMANN

Physik-Department der Technischen Universität München, D-8046 Garching, Germany

Résumé. — On présente une étude sur le tantale hydrogéné à l'aide de la résonance de haute résolution de 6,2 keV du ^{181}Ta [1]. Utilisant une source à raie unique de $^{181}\text{W(W)}$, on a mesuré le déplacement isomérique (S) en fonction de la concentration c en hydrogène d'un absorbant de tantale métallique. (c est le rapport atomique H/Ta.) Les feuilles de tantale ont été hydrogénées par voie électrolytique ; c est déduit du changement relatif de la constante de réseau, $\Delta a/a$, obtenue par diffraction de rayons X. Dans la gamme des concentrations étudiées (c allant de 0 à 0,147), S augmente de 10 mm/s, ce qui correspond à environ 80 largeurs de raie expérimentales. La variation de S peut être ajustée à une droite de pente $dS/dc = + 62$ mm/s indiquant que $\rho(0)$ décroît lorsque c croît.

La valeur observée pour dS/dc provient de deux contributions : 1) une variation de volume et 2) un changement explicite dans la structure électronique du tantale. La première peut être estimée à partir de mesures sous pression du Ta métallique [1] ; elle rend compte d'environ un tiers de la valeur de dS/dc . Il existe donc une diminution explicite de $\rho(0)$ avec une concentration croissante en hydrogène. Utilisant les densités électroniques déduites des calculs de Dirac-Fock pour les configurations d'ion libre du Ta (J. B. Mann, Los Alamos, communication privée 1972), on conclut qu'entre 50 % et 100 % des électrons apportés par l'hydrogène remplissent les orbitales de conduction vides 5d du Ta.

Abstract. — A study of hydrided tantalum metal is reported, using the high-resolution 6.2-keV resonance of ^{181}Ta [1]. With a single-line source of $^{181}\text{W(W)}$ the isomer shift (S) was measured as a function of the hydrogen concentration c of a tantalum metal absorber (c is defined as the H/Ta atom ratio). The tantalum metal foils were hydrided electrolytically ; c was derived from the relative change of the lattice constant, $\Delta a/a$, as obtained by X-ray diffraction. Within the studied concentration range (from $c = 0$ to $c = 0.147$) S increases by 10 mm/s, which corresponds to about 80 experimental linewidths. The change in S can be approximated by a straight line with a slope of $dS/dc = + 62$ mm/s indicating a decrease of $\rho(0)$ with increasing c .

The observed value of dS/dc arises from two contributions : 1) the volume change and 2) the explicit change in the electronic structure at the tantalum. The first is to be estimated from hydrostatic pressure experiments with Ta-metal [1] ; it can account for about one third of dS/dc . An explicit decrease of $\rho(0)$ with increasing hydrogen concentration is thus present. Using electron densities from Dirac-Fock calculations for free-ion configurations of Ta (J. B. Mann, Los Alamos, private communication 1972), we conclude that between 50 % and 100 % of the hydrogen electrons must be filling up empty 5d-conduction-electron states of Ta.

(*) Present address : Ruhr-Universität, D-463 Bochum.

References

- [1] KAINDL, G., SALOMON, D. and WORTMANN, G., *Mössbauer Effect Methodology* **8** (1973) 211.