

## ИЗОПЛЕТЫ ЩЕЛОЧНЫХ ГИДРИДОВ

З.А.Матысина, С.Ю.Загинайченко, А.В.Скляр, Д.В.Щур,  
И.Б.Лимица, В.К.Пишук

Днепропетровский государственный университет,  
Днепропетровск, Украина  
Институт водородной и солнечной энергетики УАННП, Киев, Украина  
Институт проблем материаловедения НАН Украины, Киев, Украина

Целью настоящей работы является теоретическое исследование изоплет (зависимости  $\ln P$  от  $1/T$  при постоянной предельной концентрации  $S$  водорода) щелочных гидридов, расчет формулы, определяющей P-T-S кривые, обоснование и объяснение имеющихся экспериментальных данных по изменению наклона и уровня изоплет, по совпадению изоплет для некоторых концентраций фазы MeH, а также предсказание возможности проявления новых эффектов - криволинейности изоплет. Для этого выполнен расчет термодинамического потенциала гидридов металлов со структурой B1 типа NaCl методом средних энергий с учетом зависимости от давления объема кристалла, активности атомов водорода и их энергий взаимодействия с ближайшими атомами металла. Исследовано уравнение равновесия, выяснены возможные функциональные зависимости изоплет растворимости водорода в металлах. Определены физические параметры, характеризующие уровень, наклон, слияние, нелинейность изоплет.

Результаты расчетов сопоставлены с экспериментальными изоплетами для гидридов LiH, KH, NaH, имеется согласие теории с экспериментальными данными.

### 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