

## МЕТАЛЛОГИДРИДНАЯ ТЕХНОЛОГИЯ РАЗДЕЛЕНИЯ НЕРАДИОАКТИВНЫХ ИЗОТОПОВ ВОДОРОДА

Маринин В.С., Умеренкова К.Р., Соловей В.В.

*Институт проблем машиностроения им. А.Н. Подгорного НАН Украины,  
г. Харьков*

При термодинамическом описании водородной подсистемы МГ и изотопных эффектов для фазовых равновесий в гидридах переходных металлов применена модель неидеального (взаимодействующего) решеточного газа (РГ) атомов изотопов водорода. Модель решеточного газа для водородного компонента рассматривает фазовые переходы в МГ, связанные с перераспределением атомов Н (D) в металлической матрице растворов внедрения, как изменения агрегатного состояния “решеточного флюида”. Методом модифицированной теории возмущений (МТВ) учтены как прямое взаимодействия между атомами изотопов водорода, так и косвенные “деформационные” вклады в потенциальную энергию вследствие расширения решетки при растворении изотопов водорода. Равновесные свойства решеточного газа определены для базисного случая растворов внедрения с единственным типом эквивалентных междоузлий. В рамках данной модели получена связь между макроскопическими характеристиками растворов внедрения Me–H(D), в частности параметрами фазовых переходов, и микроскопическими (атомными) характеристиками водородной подсистемы и решетки металла.

В рамках предложенной модели исследован изотопный эффект на примере системы PdH<sub>x</sub>(D)<sub>x</sub>. Рассмотрено влияние изотопного состава молекулярной (газовой) фазы водорода на параметры фазовых равновесий при взаимодействии металлгидридов с водородом и определены различия равновесных давлений разложения для гидрида и дейтерида палладия.

Для отношения равновесных давлений разложения β-фаз дейтерида и гидрида получено:

$$\ln(P_{D_2}^{(PL)} / P_{H_2}^{(PL)}) = -\frac{\delta(\Delta H_{\beta \rightarrow \alpha})^{D-H}}{RT} + \frac{\delta(\Delta S_{\beta \rightarrow \alpha})^{D-H}}{R}, \quad (1)$$

где  $\delta(\Delta A_{\beta \rightarrow \alpha})^{D-H} = \Delta A_{\beta \rightarrow \alpha}^{(D)} - \Delta A_{\beta \rightarrow \alpha}^{(H)}$  – разность термодинамических параметров разложения β-фаз Pd–D и Pd–H. Используя осредненные показатели параметров  $\overline{\Delta H_{\beta \rightarrow \alpha}}^{(D)}$ ,  $\overline{\Delta S_{\beta \rightarrow \alpha}}^{(D)}$  и соответствующие характеристики для гидридных фаз PdH<sub>x</sub>(D)<sub>x</sub>  $\overline{\Delta H_{\beta \rightarrow \alpha}}^{(H)} = 40,51$  кДж/моль H<sub>2</sub>,  $\overline{\Delta S_{\beta \rightarrow \alpha}}^{(H)} = 96,34$  Дж/(К·моль H<sub>2</sub>), было получено уравнение для определения отношения  $P_{D_2}^{(PL)} / P_{H_2}^{(PL)}$ :

$$P_{D_2}^{(PL)} / P_{H_2}^{(PL)} = \exp\left(\frac{528,7}{T} - 0,07\right), \quad (2)$$

имеющее важное значение для практической реализации металлгидридной технологии разделения изотопов водорода.