

**МЕТАЛОГІДРИДНА ТЕХНОЛОГІЯ ОЧИЩЕННЯ ВОДНЮ****Умеренкова К.Р.***Національний університет цивільного захисту України,  
м. Харків*

Робота присвячена застосуванню методики розрахунку параметрів фазових переходів в металогідридах (МГ), що використовуються при проектуванні й експлуатації систем очищення газоподібного водню. Побудована математична модель описує фазові діаграми систем метал-водень – співвідношення між тиском сорбції (десорбції), складом і температурою МГ (РСТ-діаграми). Запропоновано новий підхід до проблеми розрахунку фазових рівноваг у МГ, який полягає у визначенні властивостей водневої підсистеми гідриду, а також рівноважної з ним молекулярної фази  $H_2$  у рамках єдиного методу – модифікованої схеми теорії збурень. Термодинамічний опис водневої підсистеми в області неупорядкованих фаз виконано на основі моделі неідеального (взаємодіючого) решіткового газу атомів водню. При цьому враховані взаємодія між атомами водню і дилатація металевої матриці у процесі сорбції водню.

Математична модель фазових діаграм гідридних систем – як в гомогенних фазових полях, так і в області двофазних  $\alpha$ - $\beta$ -рівноваг формалізована у вигляді системи рівнянь, що описують рівність тисків та хімічних потенціалів фаз. Гілки кривої розпаду гомогенної фази системи Me-H (СТ-діаграми) на неупорядковані фази  $x=\alpha, \beta$  визначаються умовами паро-рідинної рівноваги:

$$\begin{cases} p_H(\theta_\alpha, T) = p_H(\theta_\beta, T); \\ \mu_H^+(\theta_\alpha, T) = \mu_H^+(\theta_\beta, T), \end{cases}$$

де  $p_H(\theta, T)$  – тиск решіткового газу

$$p_H(\theta, T) = \frac{kn_M c_s T}{v_0} \left[ -\frac{\ln(1-\theta)}{1+\alpha c_s \theta} + \frac{W_1/2}{T} \left( \frac{\theta}{1+\alpha c_s \theta} \right)^2 + \frac{2W_2/3}{T^2} \left( \frac{\theta}{1+\alpha c_s \theta} \right)^3 \right].$$

Фазові діаграми (РСТ-діаграми в області  $\alpha$ - $\beta$ -рівноваг), що пов'язують тиск  $p_{H_2}$  газоподібної фази  $H_2$  с параметрами  $c, T$  гідриду, одержані з умови рівності хімічних потенціалів H-підсистеми гідриду  $\mu_H(c, T)$  і  $H_2$ -фази  $\mu_{H_2}(p_{H_2}, T)$  в розрахунку на атом H:

$$\frac{1}{2} \mu_{H_2}(p_{H_2}, T) = \mu_H(c, T) \cdot$$

Для гідридів на основі  $LaNi_5$  розраховані ізотерми розчинності водню в широкому діапазоні тисків добре узгоджуються з експериментальними даними.