

## ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУРНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ ПРИ ГИДРИРОВАНИИ ФУЛЛЕРИТА. РАСТВОРИМОСТЬ ВОДОРОДА

Загинайченко С.Ю., Матысина З.А., Щур Д.В., Чумак В.А.

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

Изучение процессов гидрирования и дегидрирования фуллеренов представляет интерес в связи с различными их практическими приложениями, в том числе в связи с разработкой систем накопления и хранения водорода.

В работе выполнено теоретическое исследование структурного фазового перехода от простой кубической (ПК) решетки к объемно-центрированной (ОЦК) в фуллерите при его гидрировании. На базе молекулярно-кинетических представлений проведен расчет свободной энергии кристалла, учитывая взаимодействие ближайших фуллеренов  $\Phi_1\Phi_1$ ,  $\Phi_2\Phi_2$ ,  $\Phi_1\Phi_2$  ( $\Phi_1=C_{60}$ ,  $\Phi_2=C_{70}$ ), а также фуллеренов с атомами водорода  $\Phi_1H$ ,  $\Phi_2H$  и атомов водорода между собой  $HH$ . Получена зависимость свободной энергии от температуры, состава фуллерита, концентрации водорода, его активности и энергетических параметров. Рассчитана температура фазового перехода типа  $ПК \leftrightarrow ОЦК$  при гидрировании фуллерита, определены условия ее реализации. Построены фазовые диаграммы, определяющие зависимость температуры превращения  $ПК \leftrightarrow ОЦК$  от содержания водорода. Рассчитана температурная зависимость растворимости водорода в фуллерите. Установлены условия увеличения и уменьшения растворимости водорода с повышением температуры. Результаты теоретических расчетов сопоставлены с экспериментальными данными. Выполненные расчеты позволили объяснить и обосновать структурные превращения фуллерита при его гидрировании, а также обосновать возможность образования простейших гидридов фуллеренов при твердофазном гидрировании.

Литература

1. Isayev KB, Schur DV, Study of thermophysical properties of a metal-hydrogen system, International journal of hydrogen energy, 21, 11, 1129-1132, 1996, Pergamon
2. Matysina ZA, Zaginaichenko SYu, Schur DV, Hydrogen solubility in alloys under pressure, International journal of hydrogen energy, 21, 11, 1085-1089, 1996, Pergamon
3. 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
4. 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

5. 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
6. 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