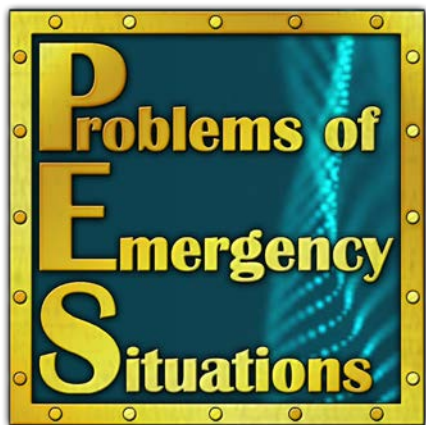


ДЕРЖАВНА СЛУЖБА УКРАЇНИ З НАДЗВИЧАЙНИХ СИТУАЦІЙ
НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ЦИВІЛЬНОГО ЗАХИСТУ УКРАЇНИ



Міжнародна
науково-практична конференція

Проблеми
надзвичайних
ситуацій

МАТЕРІАЛИ КОНФЕРЕНЦІЇ

Харків
20 травня 2021 року

МЕТАЛОГІДРИДНІ ТЕХНОЛОГІЇ ПОДІЛУ ІЗОТОПІВ ВОДНЮ

Умеренкова К.Р., к.т.н, доц.

Світлична С.Д., к.т.н, доц.

Борисенко В.Г., к.ф.-м.н, доц.

Горонескуль М.Н., викладач

Національний університет цивільного захисту України, Харків, Україна

Металогідридні технології засновані на процесі оборотної абсорбції водню гідридоутворюючими металами з утворенням металогідридів (МГ).

Математичне моделювання сорбції засноване на застосуванні моделі взаємодіючого *решіткового газу* атомів водню. Це дозволило описати фазові переходи, які спостерігаються в металогідридах.

Решітковий газ являє собою сукупність атомів, які в матриці металу утворюють свою просторову решітку. Перехід газового стану в рідину відповідає розпаду твердого розчину з малим вмістом водню (α -фаза) на два неупорядкованих розчини з меншим вмістом водню і з багатим вмістом водню. Ця область характеризується появою ділянок плато на ізотермах «тиск-склад».

Застосування модифікованої схеми теорії збурень [1] дозволило визначити властивості решіткового Н-газу і рівноважної з гідридом молекулярної фази H_2 .

Для водневої підсистеми МГ враховано *пряму взаємодію* між атомами водню і пружну енергію зв'язку, що виникає внаслідок деформації (*дилатації*) решітки при абсорбції водню в матрицю.

Тиск розкладання (дисоціації) β -фази, тобто переходу $\beta \rightarrow \alpha$, може бути представленим в традиційному вант-гофівському вигляді

$$\ln p_{X_2}^{(PL)}(T) = -\frac{\Delta H_{\beta \rightarrow \alpha}^{(X)}}{RT} + \frac{\Delta S_{\beta \rightarrow \alpha}^{(X)}}{R}, \quad (1)$$

де $X = H, D$; $\Delta H_{\beta \rightarrow \alpha}^{(X)}$, $\Delta S_{\beta \rightarrow \alpha}^{(X)}$ відповідають ентальпії і ентропії розкладання β -фаз. На рис. 1 зображені залежності тисків на плато від температури в координатах $\ln P - 1/T$ для систем Pd-H і Pd-D.

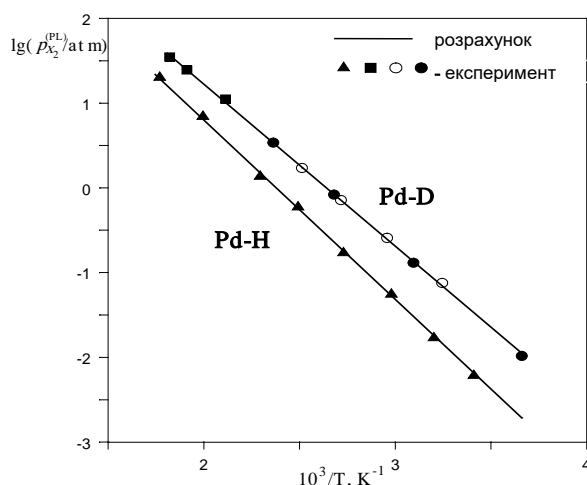


Рис. 1. Логарифм тиску розкладання β -фази систем Pd-H і Pd-D як функція зворотної температури (позначки – експеримент)

Особливий інтерес представляють металогідридні технології *поділу ізотопів водню*.

Ізотопний ефект характеризує відмінності для протію та дейтерію, які спостерігаються на температурних залежностях рівноважного тиску (на плато) в двофазній області $\alpha+\beta$. Саме цим обумовлена можливість використання металогідридів в системах поділу ізотопів, очищення і збагачення водню.

Розроблена модель решіткового газу застосована для дослідження ізотопного ефекту системи $\text{PdH}_x(\text{D}_x)$, тобто відношення рівноважних тисків розкладання β -фаз дейтериду і гідриду $P_{\text{D}_2}^{(PL)} / P_{\text{H}_2}^{(PL)}$.

Згідно (1) для відношення рівноважних тисків розкладання β -фаз дейтериду і гідриду отримаємо:

$$\ln(P_{\text{D}_2}^{(PL)} / P_{\text{H}_2}^{(PL)}) = -\frac{\delta(\Delta H_{\beta \rightarrow \alpha})^{D-H}}{RT} + \frac{\delta(\Delta S_{\beta \rightarrow \alpha})^{D-H}}{R},$$

де $\delta(\Delta A_{\beta \rightarrow \alpha})^{D-H} = \Delta A_{\beta \rightarrow \alpha}^{(D)} - \Delta A_{\beta \rightarrow \alpha}^{(H)}$ – різниця термодинамічних параметрів розкладання β -фаз Pd-D и Pd-H .

Використовуючи усереднені параметри гідридних фаз $\overline{\Delta H}_{\beta \rightarrow \alpha}^{(D)} = 36,11$ кДж/моль D_2 , $\overline{\Delta S}_{\beta \rightarrow \alpha}^{(D)} = 95,76$ Дж/(К·моль D_2) и $\overline{\Delta H}_{\beta \rightarrow \alpha}^{(H)} = 40,51$ кДж/моль H_2 , $\overline{\Delta S}_{\beta \rightarrow \alpha}^{(H)} = 96,34$ Дж/(К·моль H_2), отримано просте рівняння для відношення $P_{\text{D}_2}^{(PL)} / P_{\text{H}_2}^{(PL)}$:

$$P_{\text{D}_2}^{(PL)} / P_{\text{H}_2}^{(PL)} = \exp\left(\frac{528,7}{T} - 0,07\right).$$

У роботі розглянуто питання теоретичного прогнозування характеристик, при яких відбувається поділ ізотопів водню в системі газ - метал.

Для системи $\text{Pd-H}_2(\text{D}_2)$ спостерігається *зворотний* ізотопний ефект. Тиск ізотопів водню на «плато» рівнозначних ізотерм розчинності більш важкого ізотопу D_2 більше, ніж у H_2 . Природа зворотного ізотопного ефекту визначається, головним чином, більш низьким значенням енергії (D-D) -взаємодії в решітці у порівнянні з (H-H) -взаємодією. З іншого боку, важливим фактором є відмінність енергій нульових коливань атомів протію і дейтерію в решітці металу.

ЛІТЕРАТУРА

1. Маринин В.С. Теплофизика альтернативных энергоносителей. - Харьков: Форт, 1999. - 212 с.