

СТРУКТУРА ДЕЙТЕРИДА $\text{NbVCoD}_{2,3}$, СИНТЕЗИРОВАННОГО ПРИ ВЫСОКОМ ГАЗОВОМ ДАВЛЕНИИ (ДО 2000 АТМ)

Лушников С.А., Глазков В.П.,⁽¹⁾ Соменков В.А.,⁽¹⁾ Вербетский В.Н.

Московский Государственный Университет, Химический факультет, 119992 Ленинские горы, Москва, Россия.

(1)Российский Научный Центр «Курчатовский Институт», 123182, Москва, Россия

E-mail: lushnikov@hydride.chem.msu.ru

Введение

ИМС AB_2 со структурой фаз Лавеса являются перспективными материалами для хранения водорода. При обычных давлениях (до 100 атм.), образующиеся в системе $\text{AB}_2\text{-H}_2$ гидридные фазы абсорбируют до двух массовых процента водорода. Особенностью ИМС NbVCo с гексагональной структурой фаз Лавеса является то, что при низком давлении (до 100 атм.) и комнатной температуре взаимодействие с водородом не протекает [1]. При использовании высокого давления водорода (до 2000 атм.) удалось провести синтез гидридной фазы с содержанием водорода около 3,0 Н/ИМС при комнатной температуре.

Для определения позиций атомов водорода в синтезированном гидриде было проведено нейтронографическое исследование.

Результаты и обсуждение

После синтеза дейтерида методом термодесорбции было установлено максимальное содержание дейтерия соответствующее составу $\text{NbVCoD}_{2,5}$.

Рентгенографический анализ $\text{NbVCoD}_{2,5}$ показал, что полученная гидридная фаза сохранила структурный тип исходного соединения с изотропно расширенной кристаллической решетки. С помощью нейтронной и рентгеновской дифракции определены положения атомов металла и дейтерия и их позиционные параметры.

Показано, что атомы V и Co статистически распределены главным образом в подрешетке В компонента (2a, 6h), а атомы дейтерия занимают в основном позиции 24l и 12k. Количество дейтерия рассчитанного на основе нейтронографических данных ($\text{NbVCoD}_{2,3}$) незначительно меньше, чем в дейтериде после синтеза.

Выводы

Применение высокого давления дейтерия позволило провести синтез дейтерида $\text{NbVCoD}_{2,3}$. Полученное распределение атомов дейтерия в $\text{NbVCoD}_{2,3}$ оказалось типичным для фаз Лавеса [2] и не зависит от условий гидридообразования.

Литература

1. S.A.Lushnikov, V.N.Verbetsky. Interaction in NbVCo-H and NbVFe-H Systems under Hydrogen Pressure up to 2000 atm.//Hydrogen Materials Science and Chemistry of Carbon Nanomaterials, Proceedings of the NATO Advanced Research Workshop, held in Sudak, Crimea, Ukraine, September 14-20, 2003, NATO Science Series II: Mathematics, Physics and Chemistry, Vol. 172, ed. N.Vezirogly.
2. J.L.Souberoux, D.Fruchart, A.S. Biris. Structural studies of Laves phases $\text{ZrVCo}(\text{V}_{1-x}\text{Cr}_x)$ with $0 < x < 1$ and their hydrides. J.Alloys and Compound. 1999.v. 293-295.p. 88-92.