

# ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ ОБОСНОВАНИЕ СИНТЕЗА ГИДРИДОВ МЕТАЛЛОВ

Д.Х.Насруллоева, А.Бадалов, Б.А.Гафуров  
Агентство по ядерной и радиационной безопасности  
АН Республики Таджикистан,  
г.Душанбе, Республика Таджикистан

Для выбора рациональных параметров синтеза гидридов металлов необходимо нахождение термодинамических характеристик процесса.

Как известно, измерение равновесного давления, определение значений термодинамических функций  $\Delta H_{298}^0$ ,  $\Delta G_{298}^0$ ,  $C_p = f(T)$ ,  $S_{298}^0$ , расчет энергии кристаллической решетки, а также оценочные значения термодинамических параметров – дают информацию об устойчивости и возможности синтеза гидридов металлов.

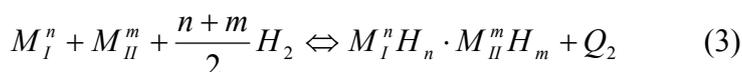
Нами анализированы литературные данные термодинамических свойств комплексных гидридов элементов I-III-A групп и лантаноидов. Рассчитаны энергии кристаллической решетки, стандартной энтропии комплексных гидридов. В ряде случаев сделаны попытки установления взаимосвязи между энергетическими характеристиками гидридов и их строением.

Обычным критерием термической стабильности гидрида при  $T$  и  $p = \text{const}$  служит теплота его образования из простых веществ  $Q_p = -\Delta H_{298}^0$ . Однако подлинной мерой устойчивости гидрида является изменение изобарно-изотермического потенциала образования из простых веществ:

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S. \quad (1)$$

Абсолютная величина  $\Delta G$  указывает, как далеко система водород-металл-гидрид отстоит от состояния равновесия. Известно, что знак  $\Delta G$  определяет возможность осуществления реакции.

Образование твердых или жидких фаз из элементов



( $n$ ,  $m$  – валентность металла) сопровождается удвоением числа связей и уменьшением числа газовых молей  $\Delta \nu < 0$ . (Для  $n$  молекул исходного водорода число связей у бинарного гидрида  $2n$ , у комплексного  $(2n+1)$ ). При умеренных температурах можно ожидать значений  $\Delta H < 0$  и относительно небольших величин  $\Delta S$ , так что  $\Delta H - T\Delta S$  сохранится еще отрицательным. Значение  $\Delta G$  будет определяться величиной  $\Delta H$  и это оправдывает оценку стабильности гидрида по величине энтальпии процесса его образования при сравнительно низких температурах.

При невысоких значениях энтальпии (что как раз наблюдается у гидридов) относительно небольшое увеличение температуры должно приводить к обращению процессов (2), (3)  $\Delta H - T\Delta S > 0$ . При этом число газовых молей будет возрастать ( $\Delta \nu > 0$ ) за счет образования молекулярного водорода, обладающего весьма прочной связью атомов, 104 ккал/моль.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Дымова Т.Н. Простые и комплексные гидриды элементов I-III групп. Получение, некоторые свойства и реакции: Дисс. докт. хим. наук. – М., 1979.
2. Кузнецов В.А., Дымова Т.Н. // Известия АН СССР, сер. хим., 1971, №2, с.260-264.