

Гидрид рутения

Михаил Александрович Кузовников
Институт физической химии ПАН
Институт физики твердого тела РАН
Варшава, сентябрь 2016

Периодическая таблица для гидридов с $P_{\text{обр}} < 10 \text{ ГПа}$

Group →	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
↓ Period	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
	1 H																2 He	
1	3 Li	4 Be															10 Ne	
2	11 Na	12 Mg															18 Ar	
3	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
4	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
5	55 Cs	56 Ba	*	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
6	*		57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu	
7																		

monohydrides

dihydrides

trihydrides

tetrahydrides

Периодическая таблица для гидридов (современное состояние)

Group → 1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
↓ Period																	
1	1 H															2 He	
2	3 Li	4 Be														10 Ne	
3	11 Na	12 Mg														18 Ar	
4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	36 Kr
5	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	54 Xe
6	55 Cs	56 Ba	*	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	86 Rn
7	*	57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu	

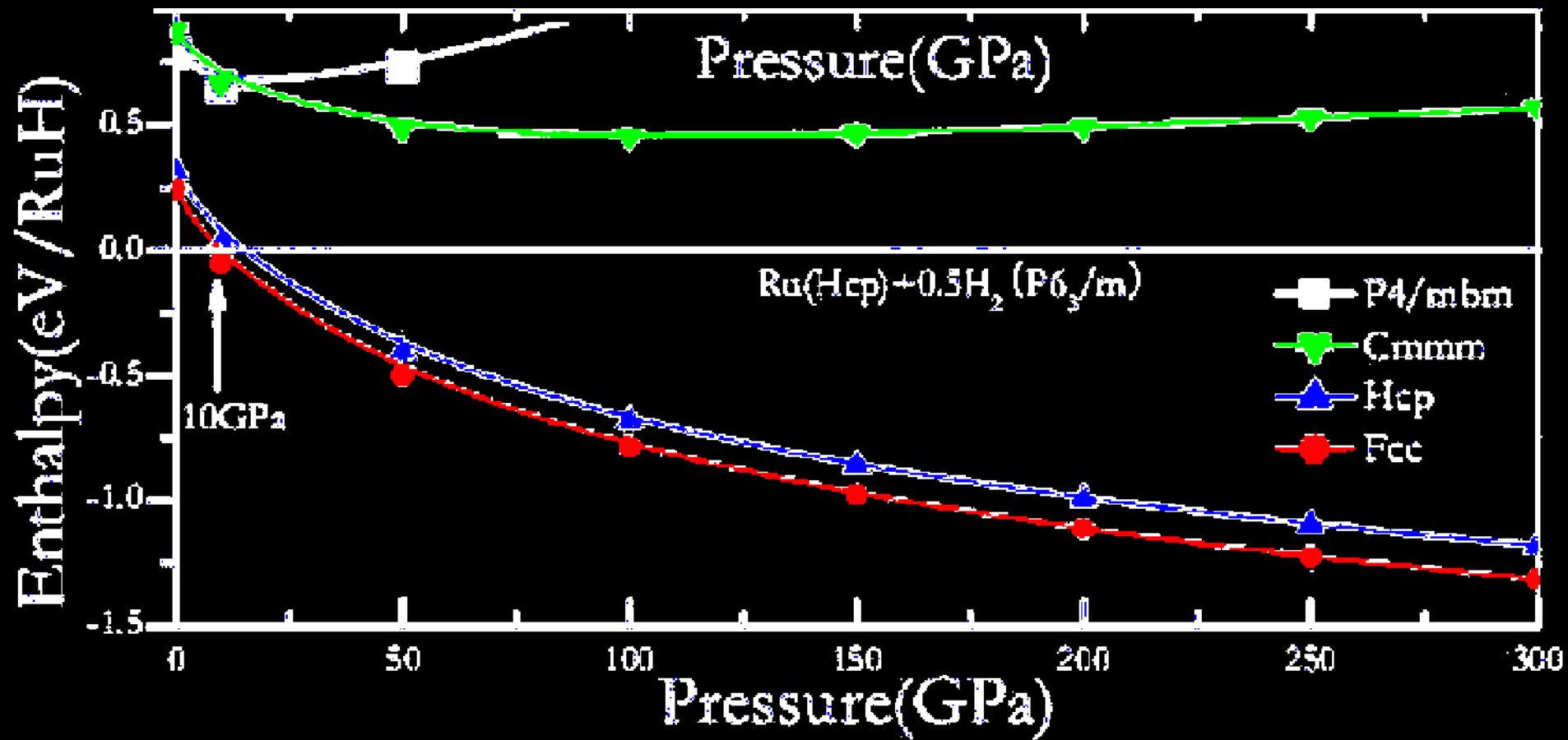
monohydrides

dihydrides

trihydrides

tetrahydrides

Ab-initio предсказание RuH



Ячейка с алмазными наковальнями для сжатия газов

Гайка поддержки поршня

Цилиндр

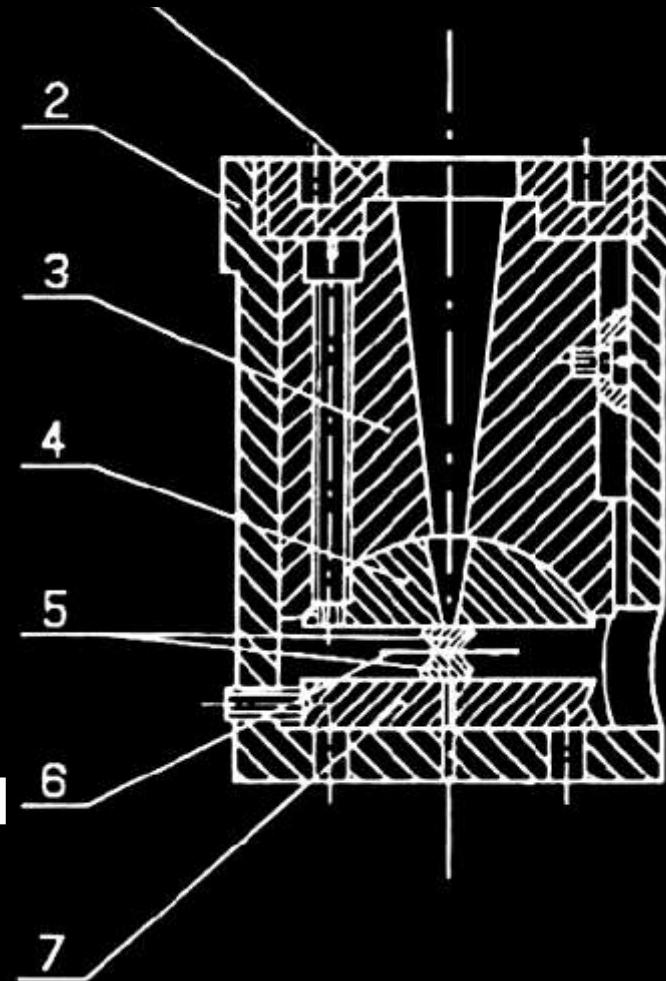
Поршень

Опорная плита

Алмазы

Прокладка из рения

Опорная плита



Камера загрузки газов до 4 кбар

Подвижный поршень
Цилиндр

Поворотный механизм

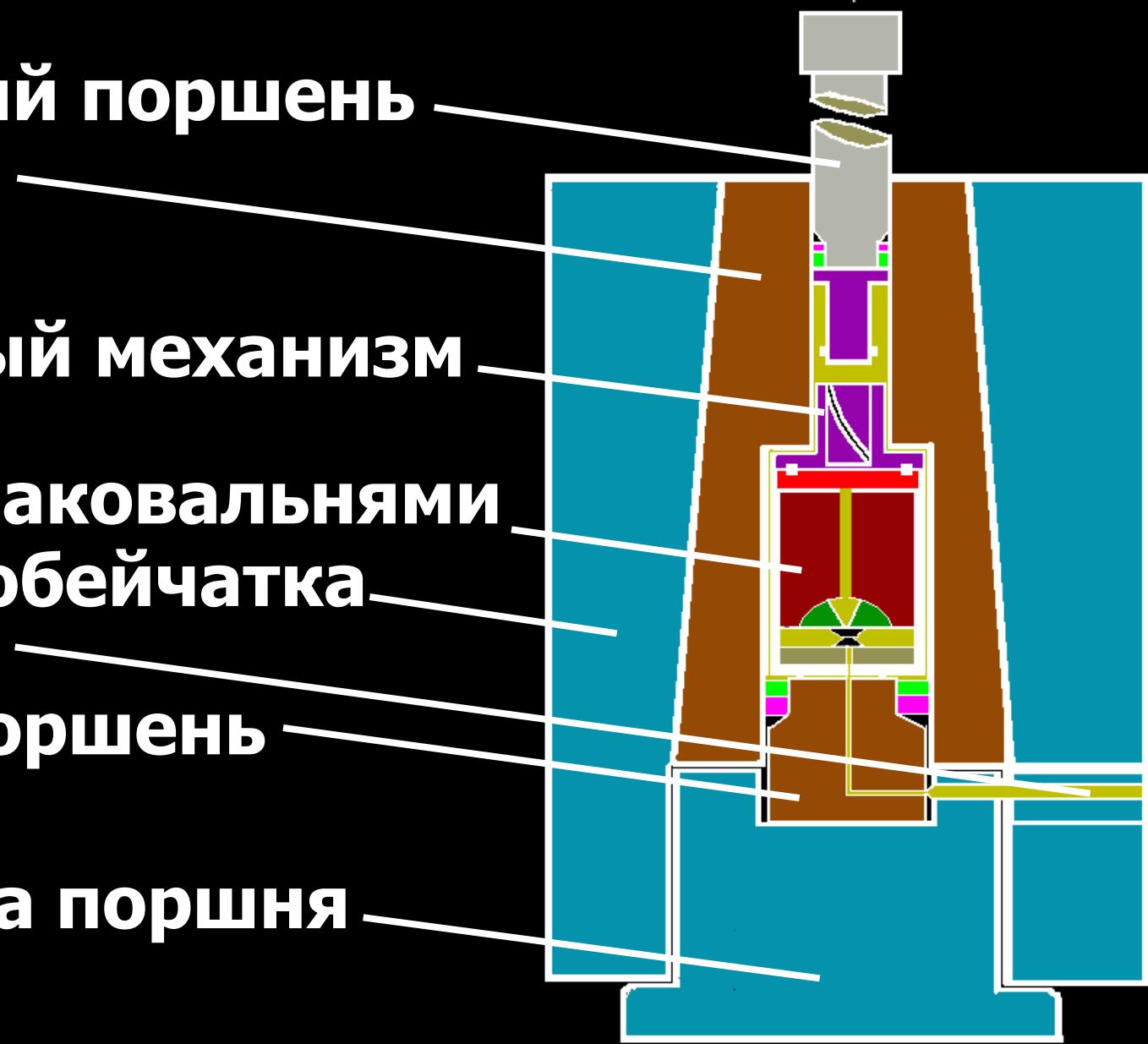
Ячейка с наковальнями

Стальная обечайка

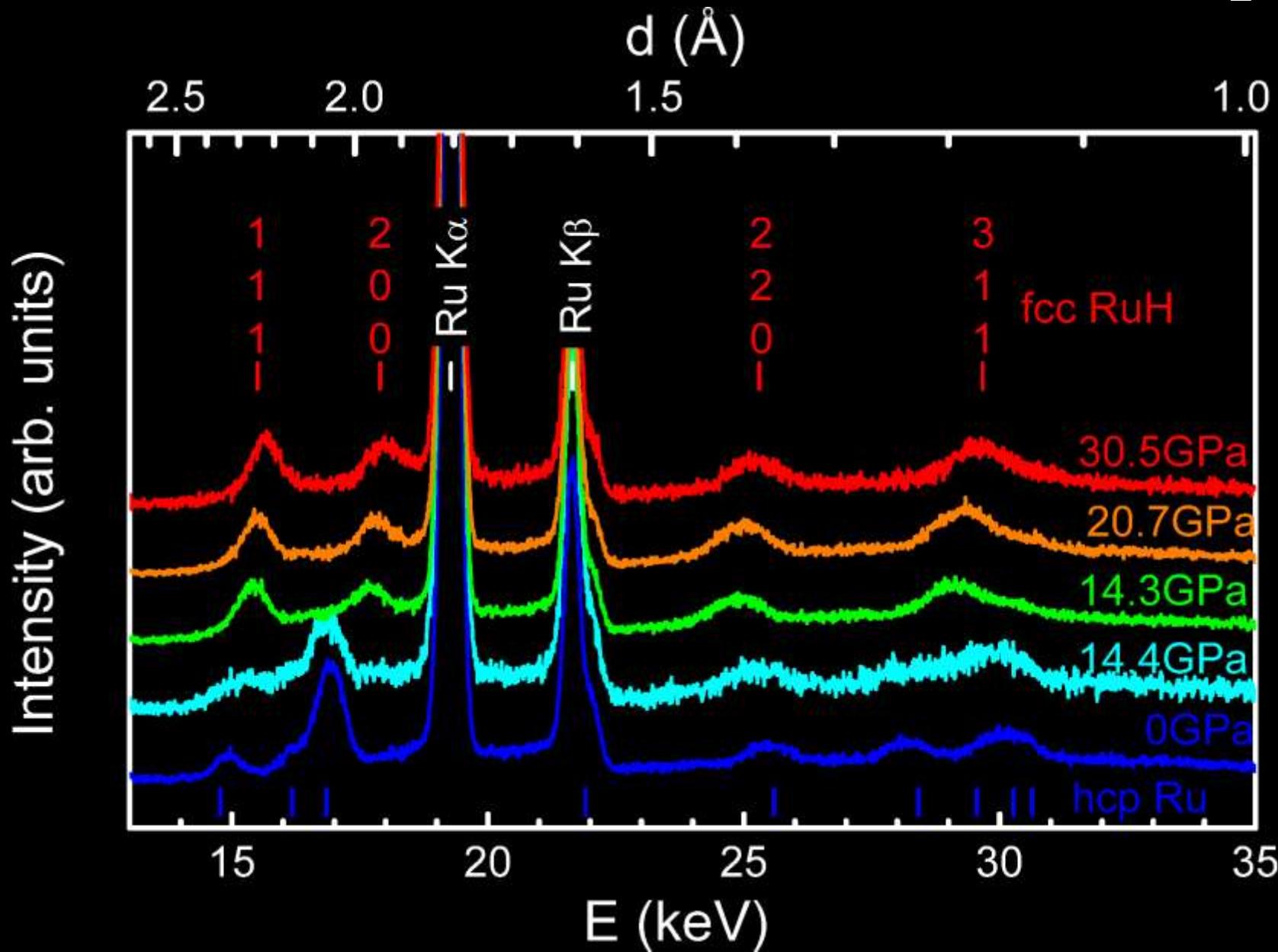
Впуск газа

Нижний поршень

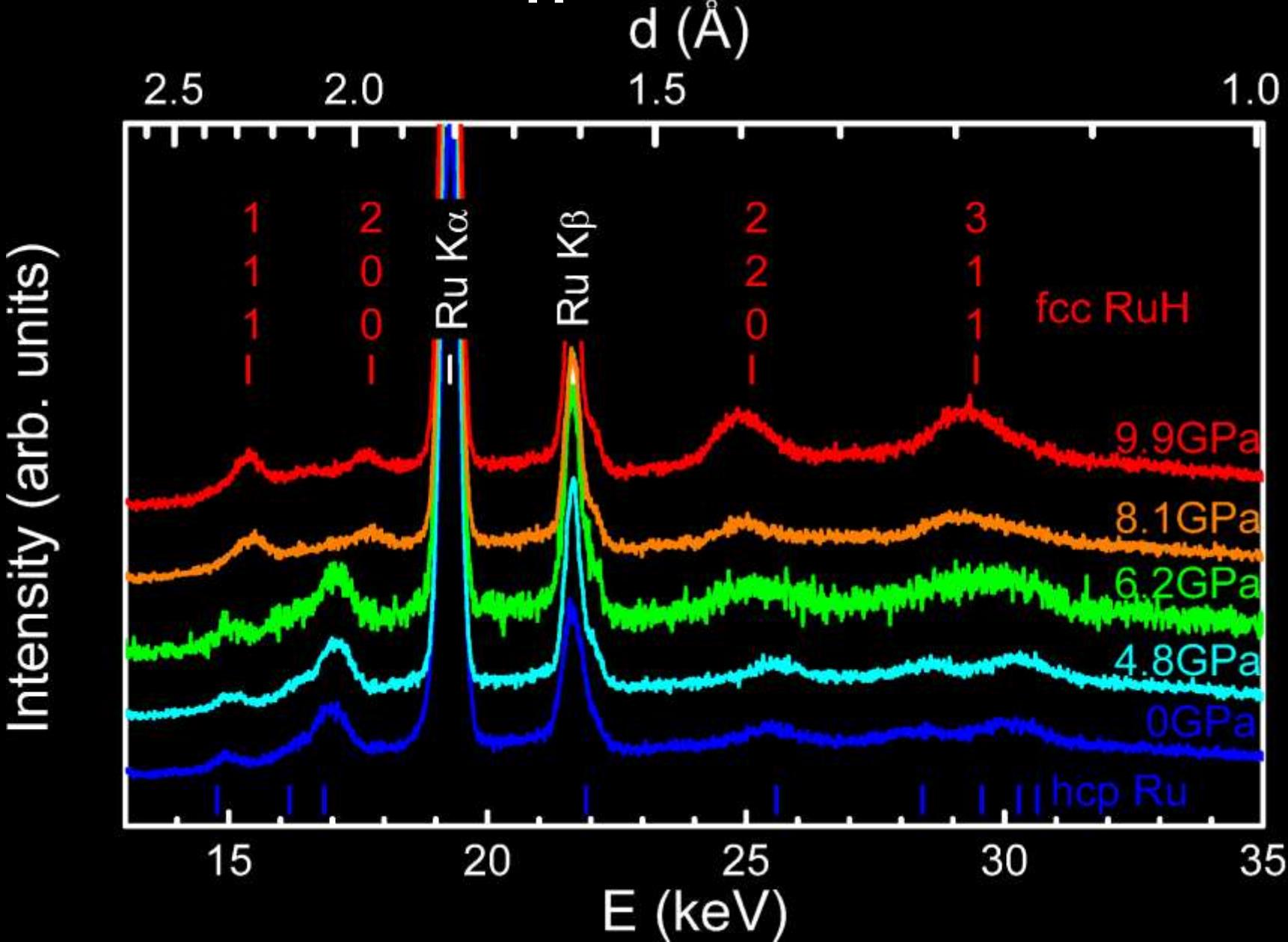
Поддержка поршня



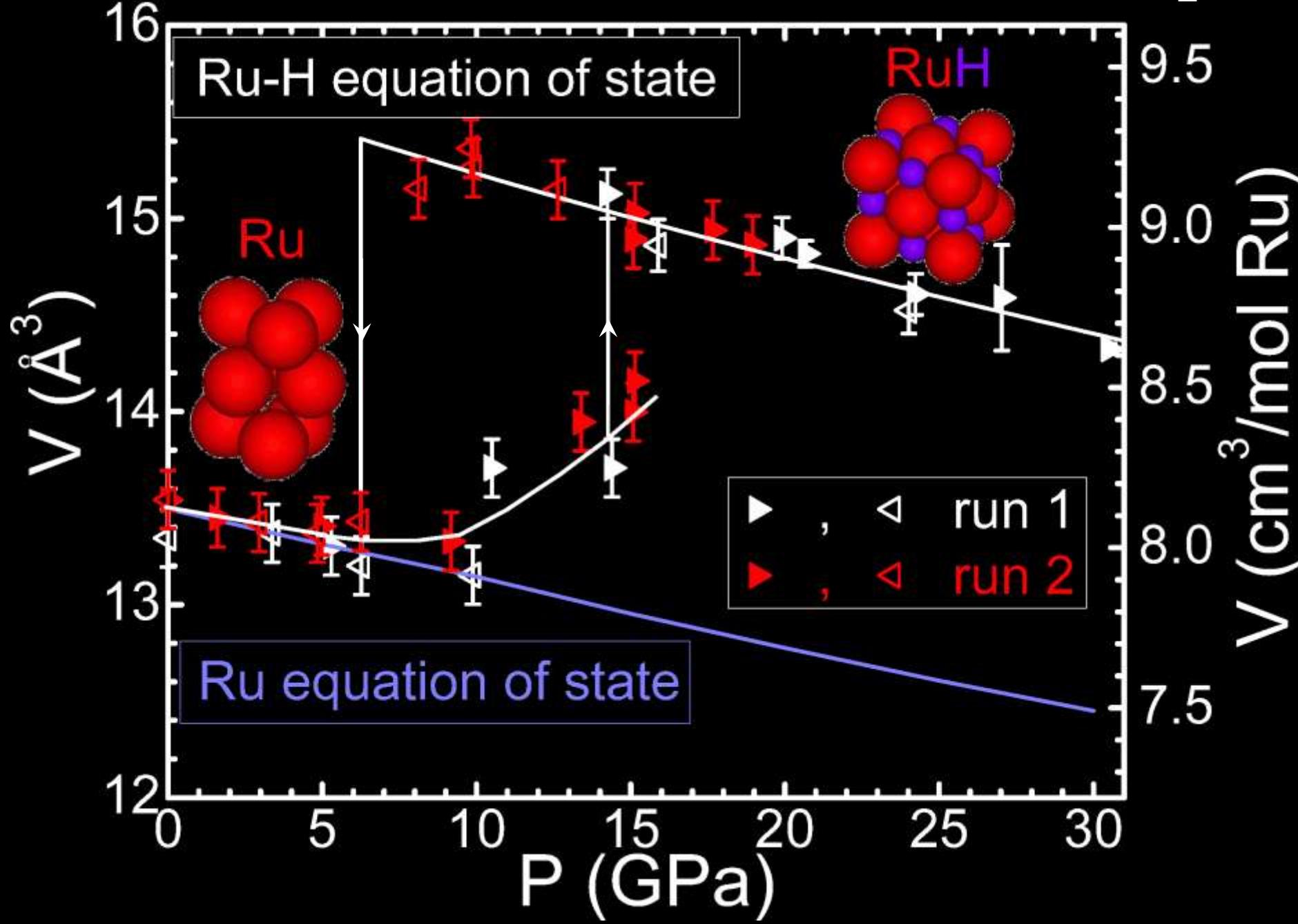
Энергодисперсионные дифракционные спектры Ru при сжатии в атмосфере H₂



Энергодисперсионные спектры при понижении давления



Зависимость $V(P)$ для Ru в атмосфере H_2



Уравнение состояния RuH

Вещество	Параметры ячейки, Å	Объём на атом Ru, Å ³	Объёмный модуль, ГПа
hcp Ru	$a=2.7058(1)$ $c=4.2816(1)$	$13.574(1)$	$320(5)$
fcc RuH	$3.98(1)$	$15.8(1)$	$290(30)$

Стандартная энергия Гиббса образования RuH

$$\Delta G^0(Ru + \frac{1}{2} H_2 \rightarrow RuH) = \int_{P_{eq}}^{P_0} \Delta V dP = \int_{P_{eq}}^{P_0} (V_{RuH} - V_{Ru} - \frac{1}{2} V_{H_2}) dP \approx$$
$$\approx -(V_{RuH} - V_{Ru}) P_{eq} + \frac{1}{2} \int_{P_0}^{P_{eq}} V_{H_2} dP \approx +37 \text{ kJ/mol}$$

Выводы:

- под высоким давлением водорода синтезирован моногидрид рутения
- RuH имеет ГЦК структуру атомов металла, в октапорах которой находится водород
- определены уравнение состояния и стандартная энергия Гиббса RuH
- рутений не образует полигидридов до $P=30$ ГПа