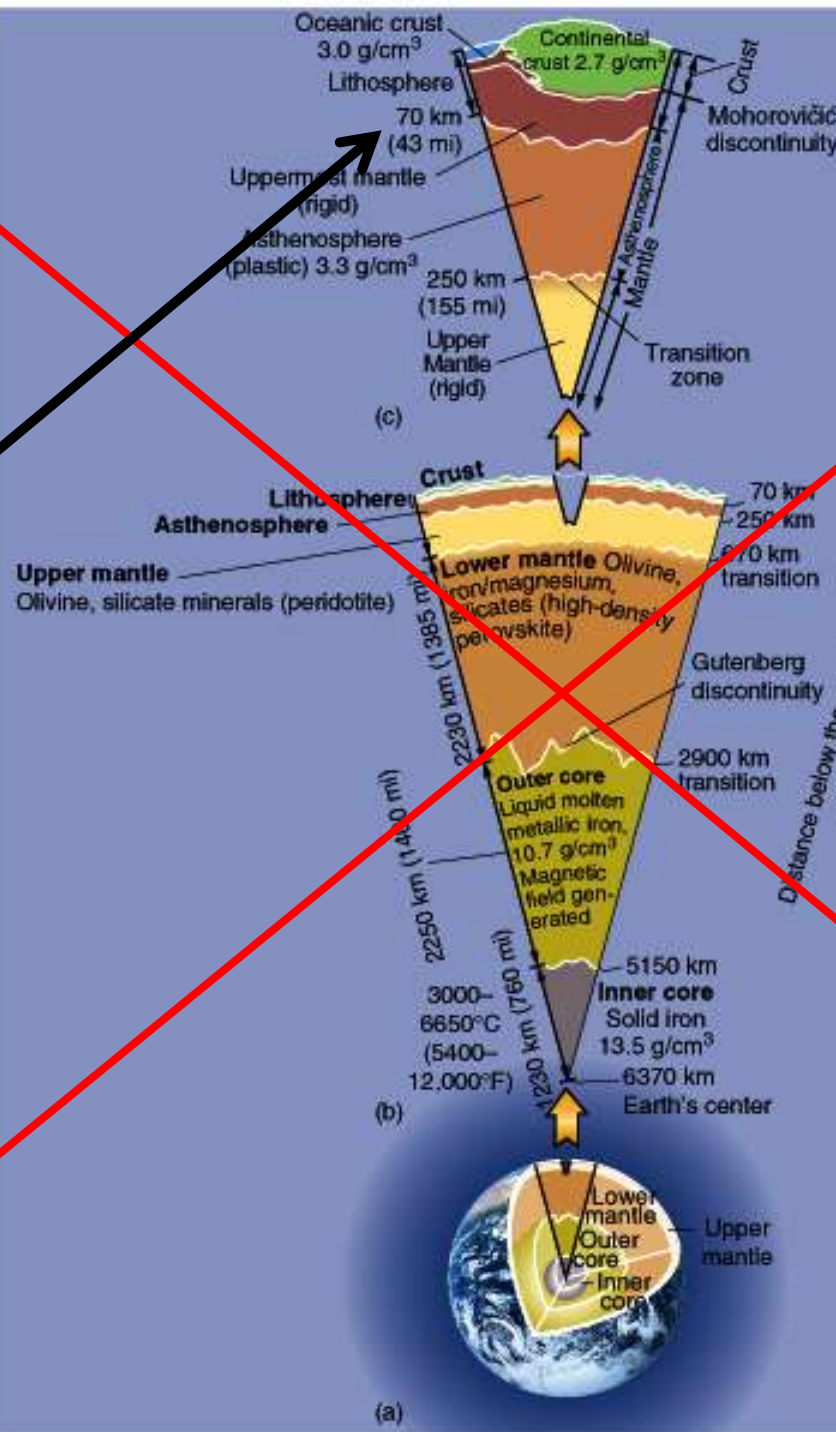


Растворимость водорода в магниево-силикатных системах при высоких давлениях

Ефимченко Вадим Сергеевич
Институт физики твердого тела РАН



?



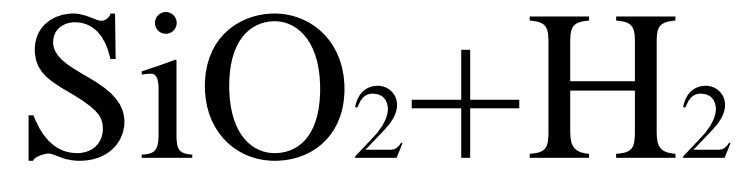
H₂, H₂O,
CH₄, CO₂,
C_xH_x, H₂S, HF

Crust

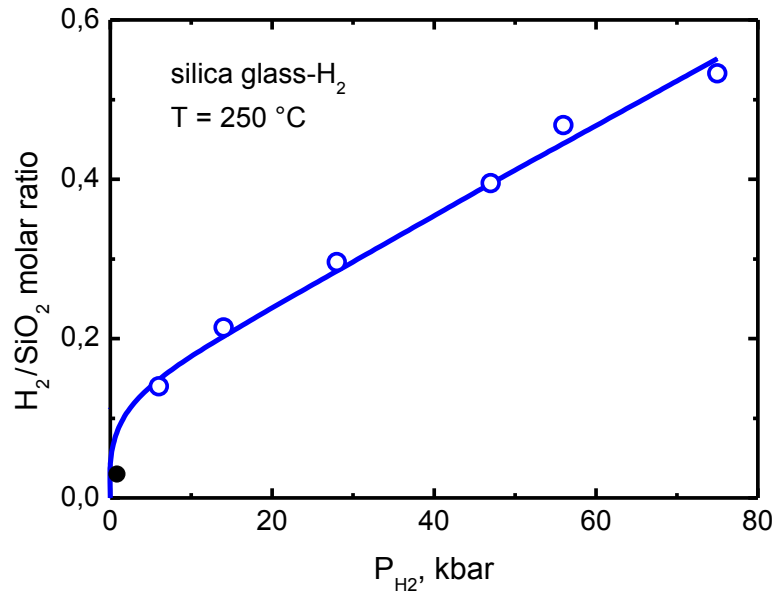
Elements	Amount wt. %
O	46.6
Si	27.7
Al	8.1
Fe	5.0
Ca	3.6
Na	2.8
K	2.6
Mg	1.5

Mantle

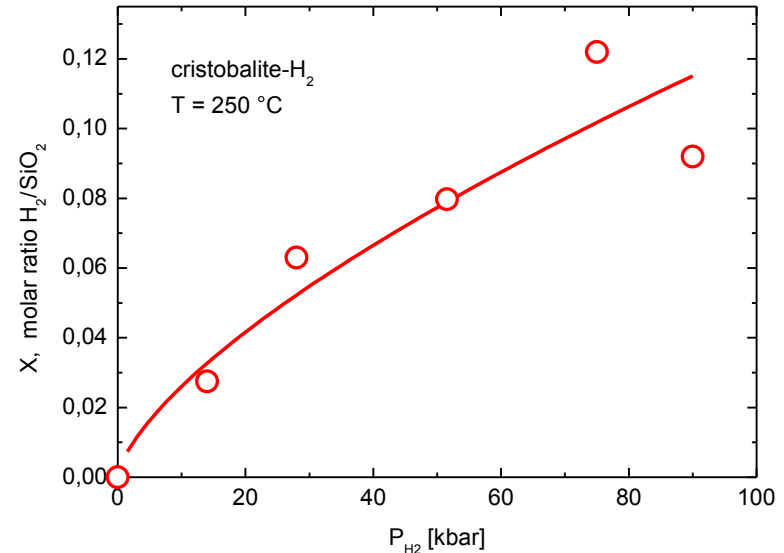
Element	Amount wt.%
O	44.8
Mg	22.8
Si	21.5
Fe	5.8
Ca	2.3
Al	2.2
Na	0.3
K	0.03



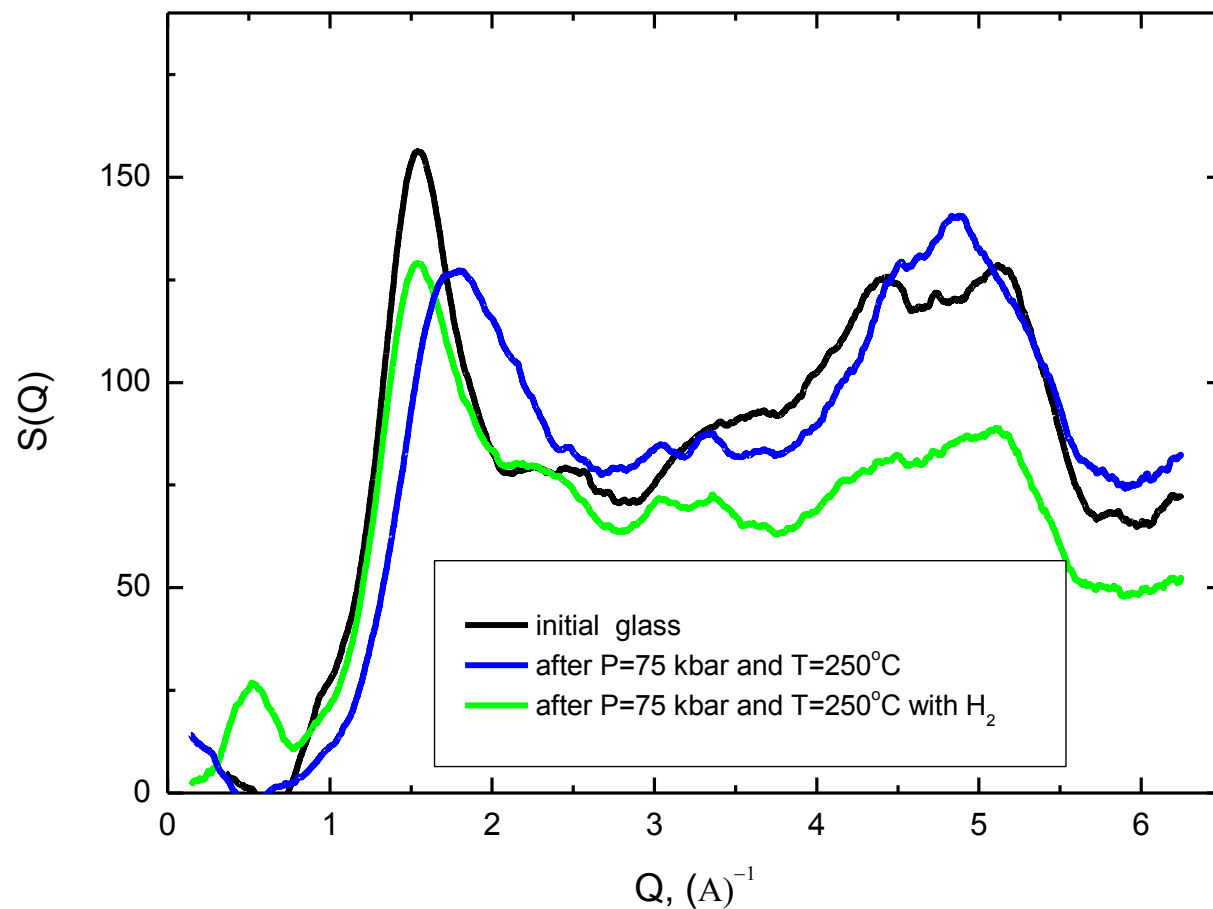
Изотермы растворимости водорода в диоксиде кремния при температуре 250°C.



Efimchenko, V. S.; Fedotov, V. K.; Kuzovnikov, M. A.; Zhuravlev, A. S.; Bulychev, B. M. Hydrogen Solubility in Amorphous Silica at Pressures up to 75 kbar *J. Phys. Chem. B*, **2013**, 117, 422–425.

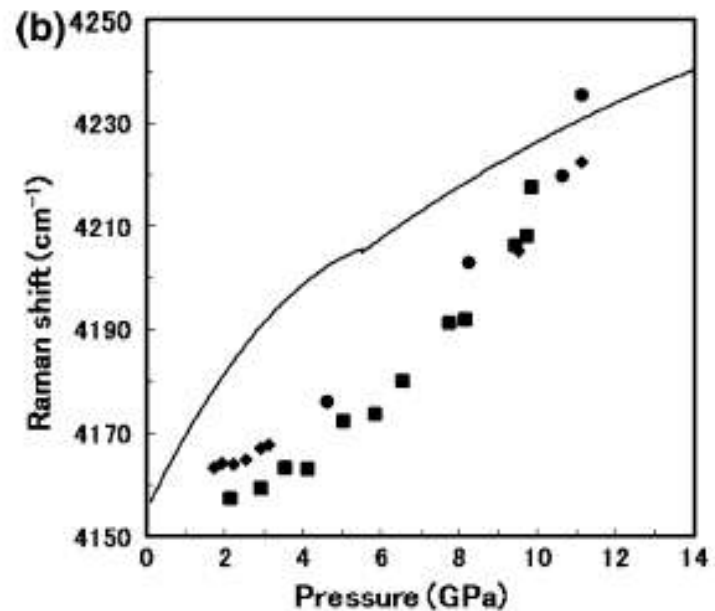
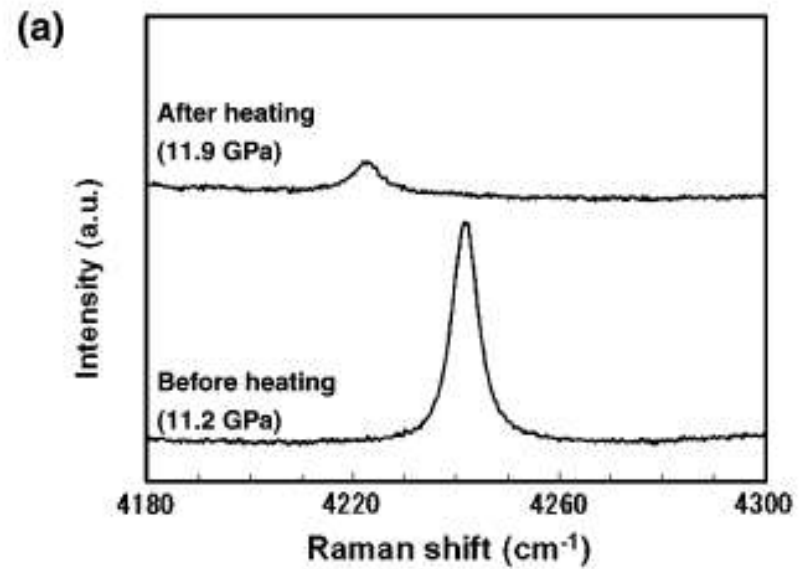
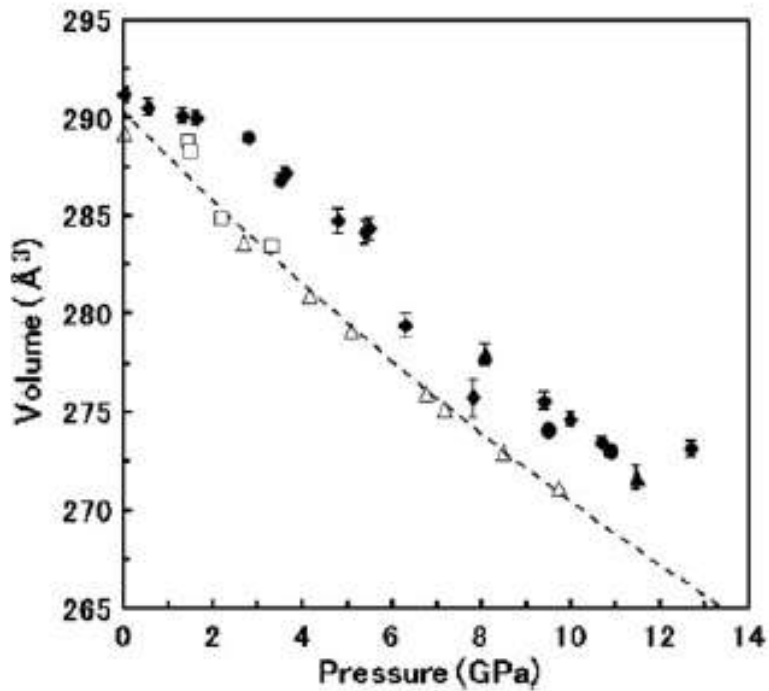


Efimchenko, V. S.; Fedotov, V. K.; Kuzovnikov, M. A.; Meletov, K. P.; Bulychev, B. M. Hydrogen Solubility in Cristobalite at High Pressure *J. Phys. Chem. A* **2014**, 118, 10268-10272



Efimchenko, V. S.; Fedotov, V. K.; Kuzovnikov, M. A.; Zhuravlev, A. S.; Bulychev, B. M. Hydrogen Solubility in Amorphous Silica at Pressures up to 75 kbar *J. Phys. Chem. B*, **2013**, 117, 422–425.



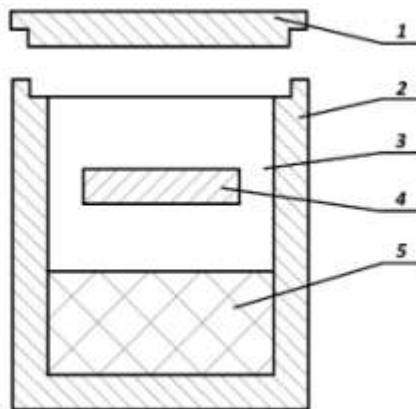


Reaction of forsterite with hydrogen molecules at high pressure and temperature
 Ayako Shinozaki · Hisako Hirai · Hiroyuki Kagi
 Phys Chem Minerals (2012) 39:123–129

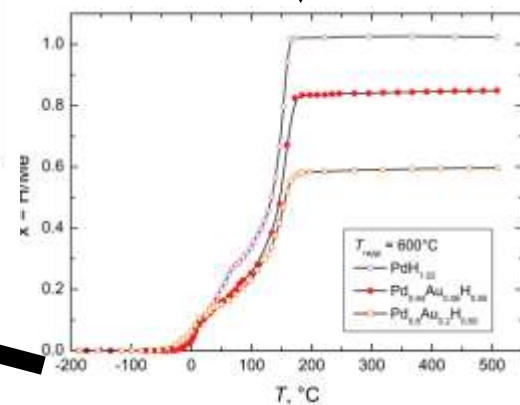
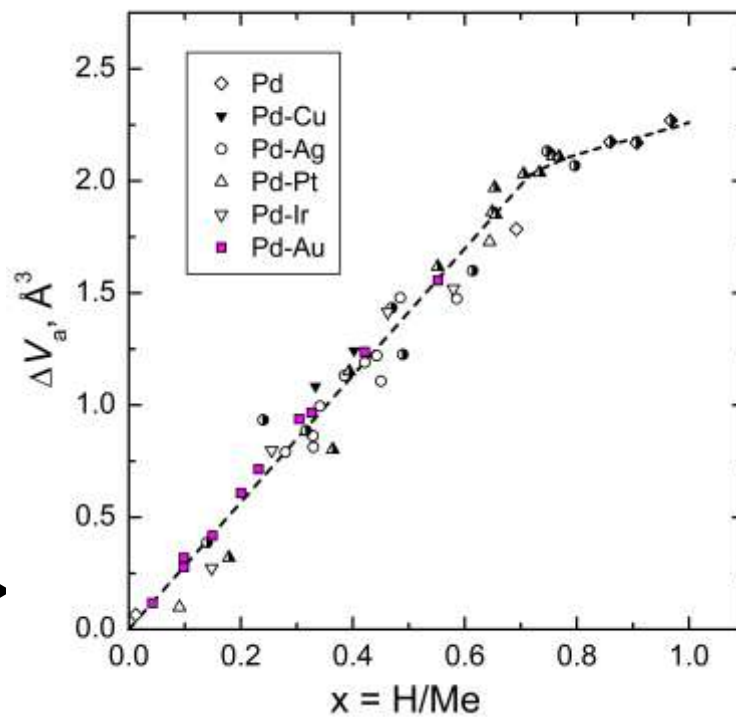
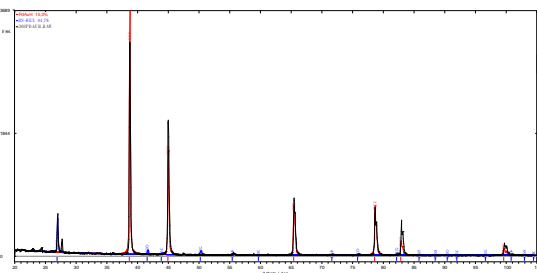
Цель исследования

Изучение растворимости водорода в различных фазах магний-содержащих силикатов до давлений, характерных для верхней мантии Земли. Исследование полученных растворов методами комбинационного рассеяния света и рентгеновской дифракции.

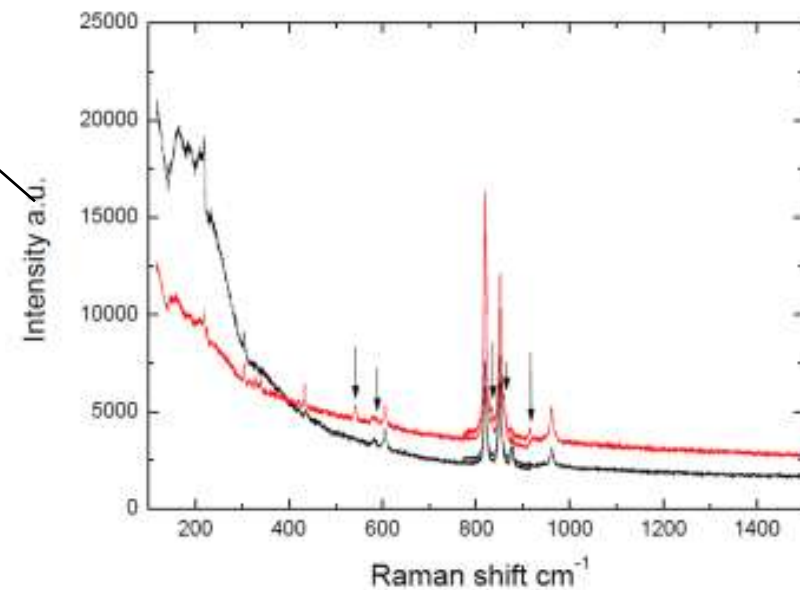
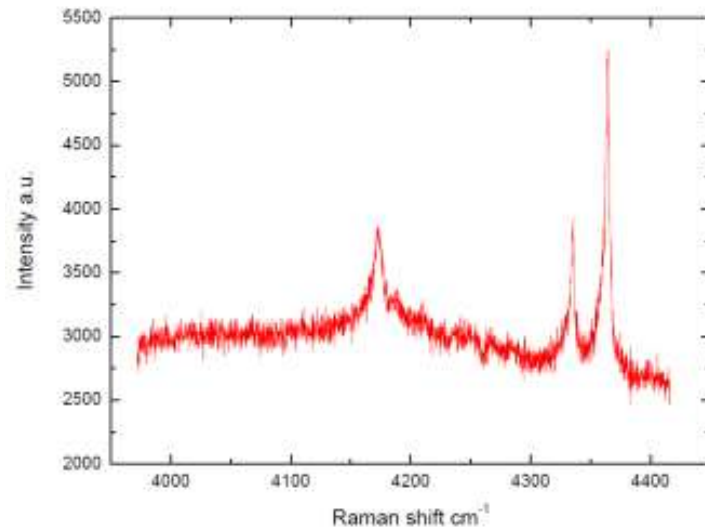
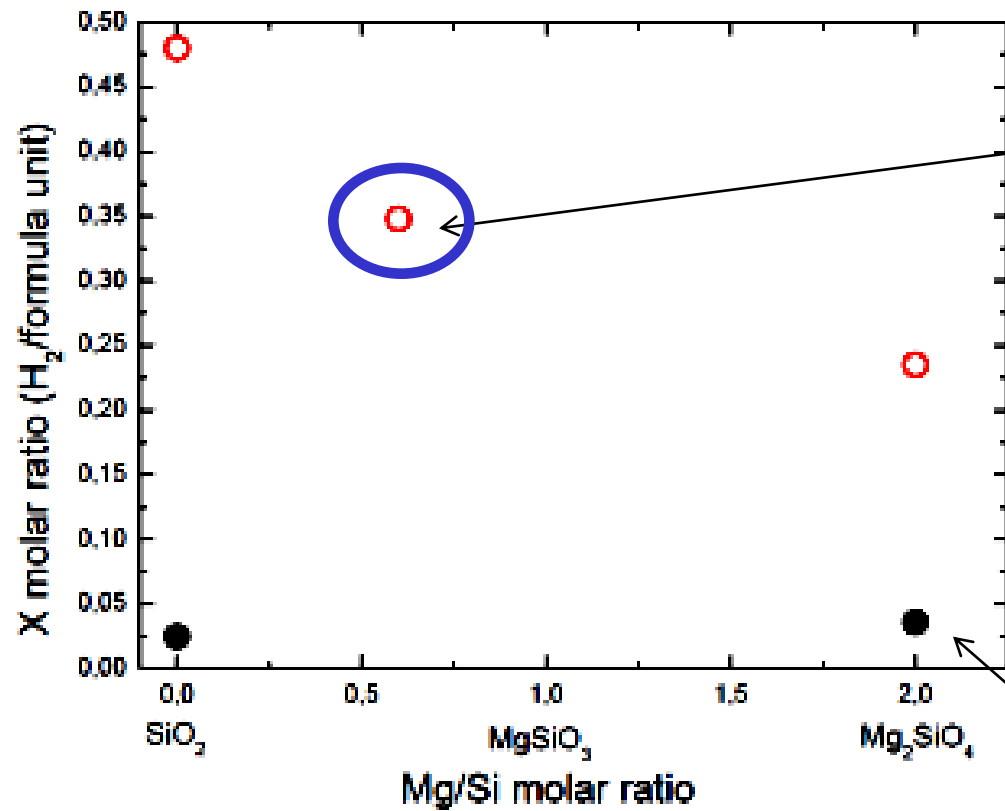
Экспериментальные методы и образцы



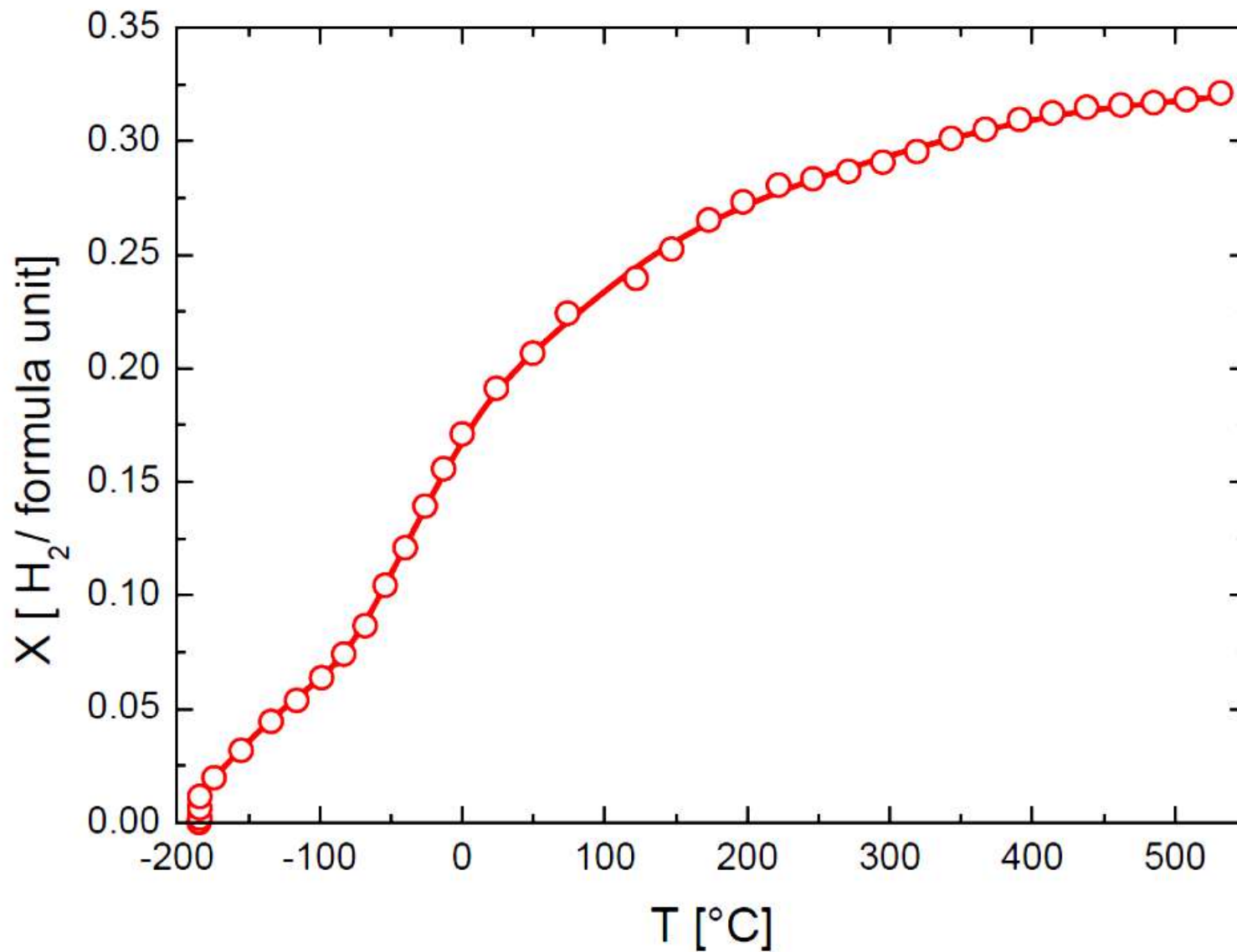
- Ячейка для капсуляции водорода.
- 1 – крышка медной ампулы
 - 2 – медная ампула
 - 3 – порошок нитрида бора
 - 4 – образец
 - 5 – источник водорода NH_3BH_3



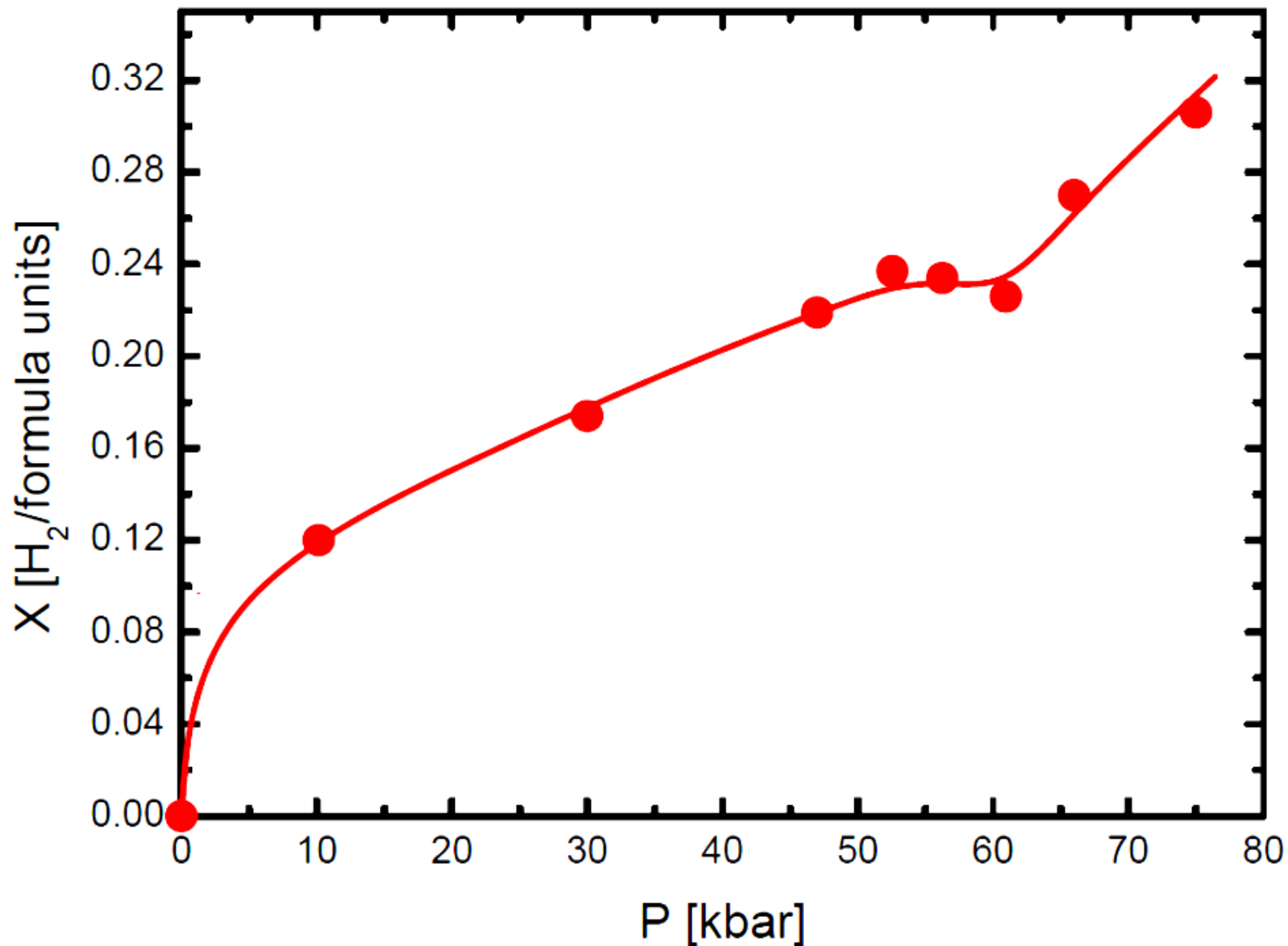
P=55 kbar, T=250 C



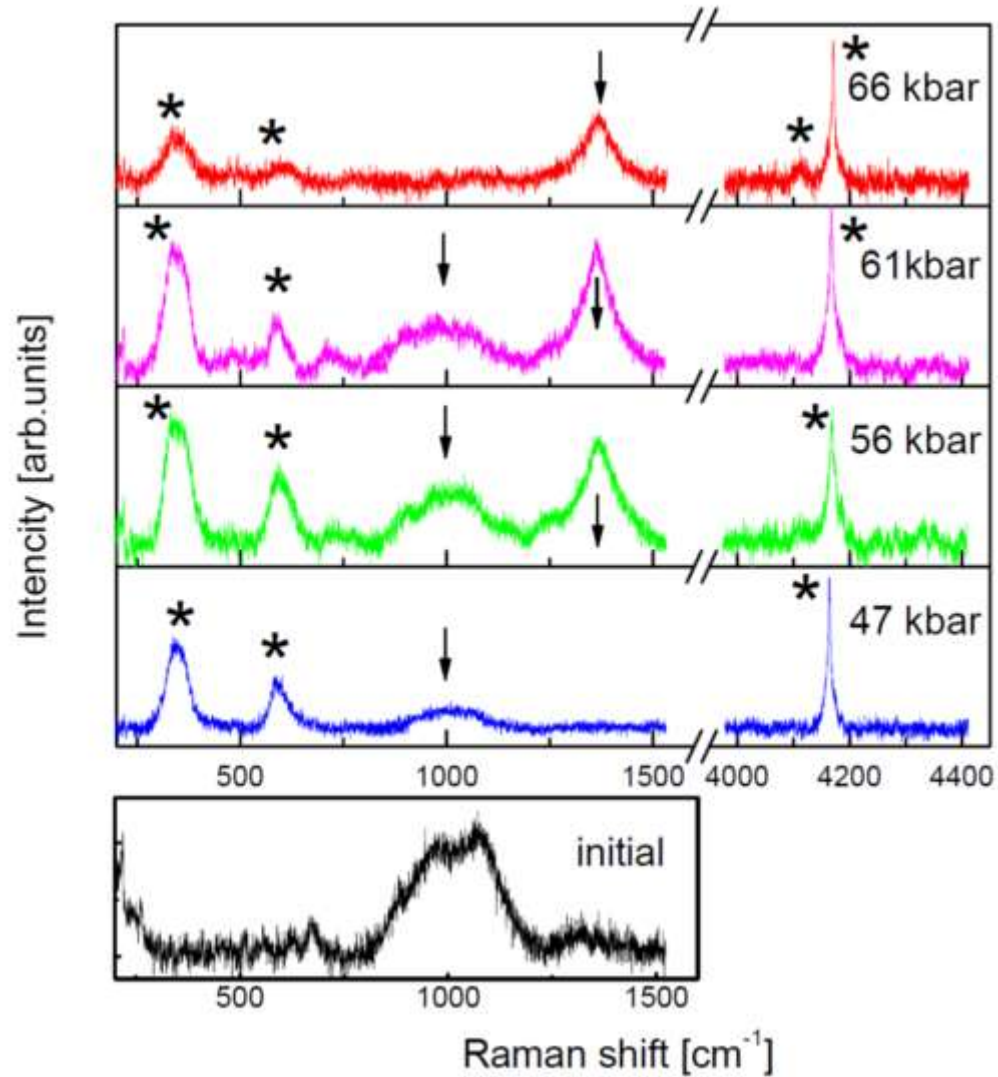
Десорбция водорода из аморфного $\text{Mg}_{0.6}\text{SiO}_{2.6}$

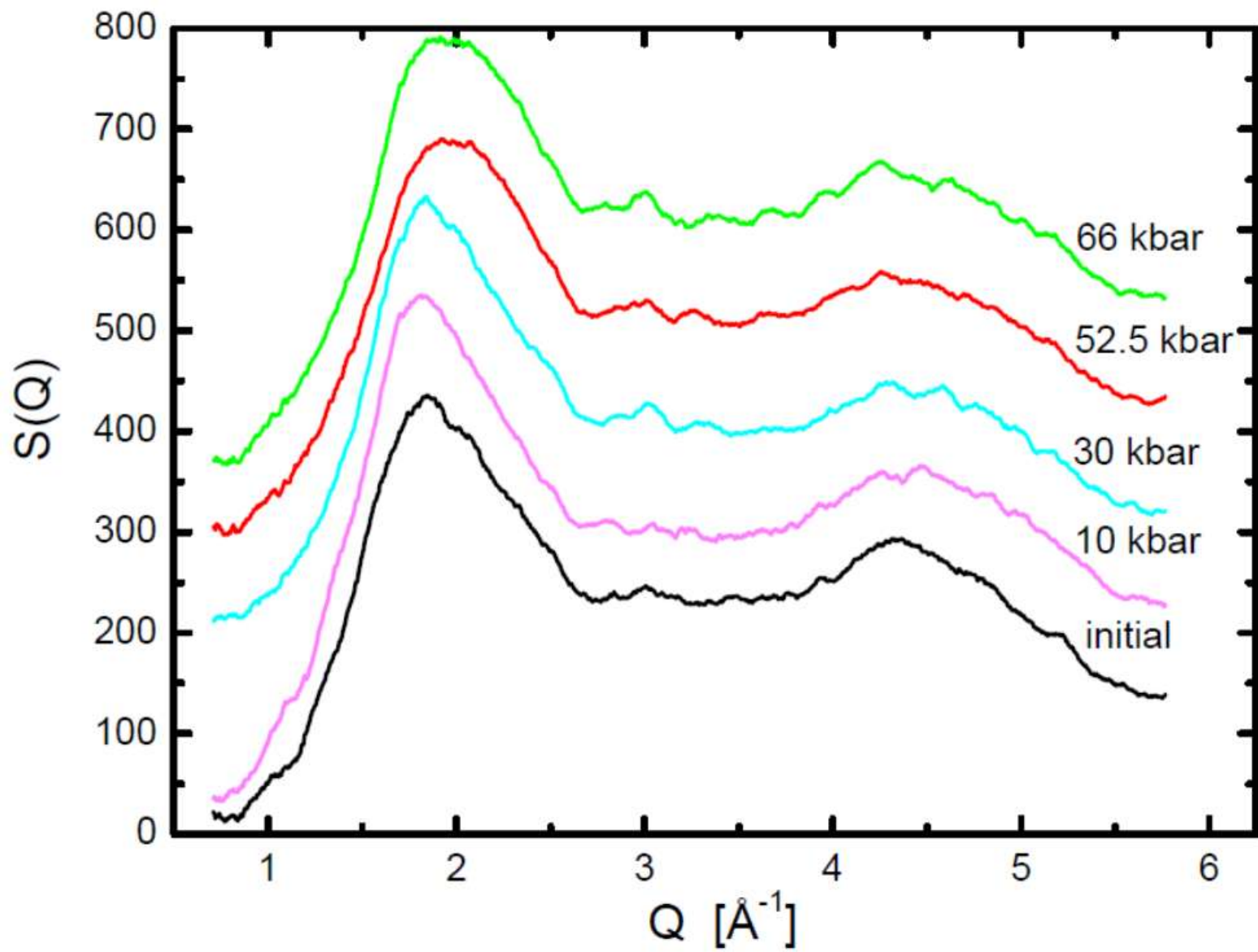


Изотерма растворимости водорода в аморфном $\text{Mg}_{0.6}\text{SiO}_{2.6}$ при температуре 250°C .



Спектры комбинационного рассеяния света $\text{Mg}_{0.6}\text{SiO}_{2.6}\text{-H}$





Результаты исследования

1. Изучена растворимость водорода в аморфных и кристаллических силикатах, содержащих магний, при $P=55$ кбар и $T=250^\circ\text{C}$. Обнаружено, что содержание водорода в кристаллических силикатах немного растет с увеличением содержания магния с $\text{H}_2/f.u.=0.025$ для коэсита (SiO_2) до $\text{H}_2/f.u.=0.035$ для форстерита (Mg_2SiO_4). В аморфных силикатах, напротив, содержание водорода понижается с $\text{H}_2/f.u.=0.48$ для кварцевого стекла (SiO_2) до $\text{H}_2/f.u.=0.23$ для аморфного форстерита (Mg_2SiO_4).
2. Построена изотерма растворимости водорода в аморфном $\text{Mg}_{0.6}\text{SiO}_{2.6}$ при 250°C . Молярное отношение $\text{H}_2/f.u.$ растет с давлением от $X = 0.14$ при $P = 10$ кбар до $X = 0.303$ при $P = 75$ кбар. Зависимость $X(P)$ нелинейна, и растворимость водорода даже немного уменьшается в интервале давлений 52.5-61 кбар.
3. Методами рентгеновской дифракции и комбинационного рассеяния света показано, что в этом интервале давлений в образце $\text{Mg}_{0.6}\text{SiO}_{2.6}\text{-H}$ происходит фазовый переход первого рода в более плотную аморфную модификацию.
4. Спектр комбинационного рассеяния света показывает, что водород растворяется в аморфном $\text{Mg}_{0.6}\text{SiO}_{2.6}$ в виде молекул H_2 . Раствор водорода в кристаллическом форстерите, помимо молекулярного, возможно, содержит водород, имеющий сильные химические связи с решеткой.

Спасибо за внимание и понимание

Планируемые исследования:

- 1) Методом закалки под давлением будут изучены зависимости концентрации водорода в коэсите, кристобалите, кварце и аморфной фазе низкой плотности от давления и температуры в интервале давлений от 6 до 75 кбар и температур до 1000°C.
- 2) Будут проведены рамановские и ИК исследования полученных кристаллических и аморфных фаз SiO₂-H.

