

Гидрид рутения

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

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

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											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
3	11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	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	35 Br	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	53 I	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	85 At	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

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											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
3	11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	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	35 Br	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	53 I	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	85 At	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		

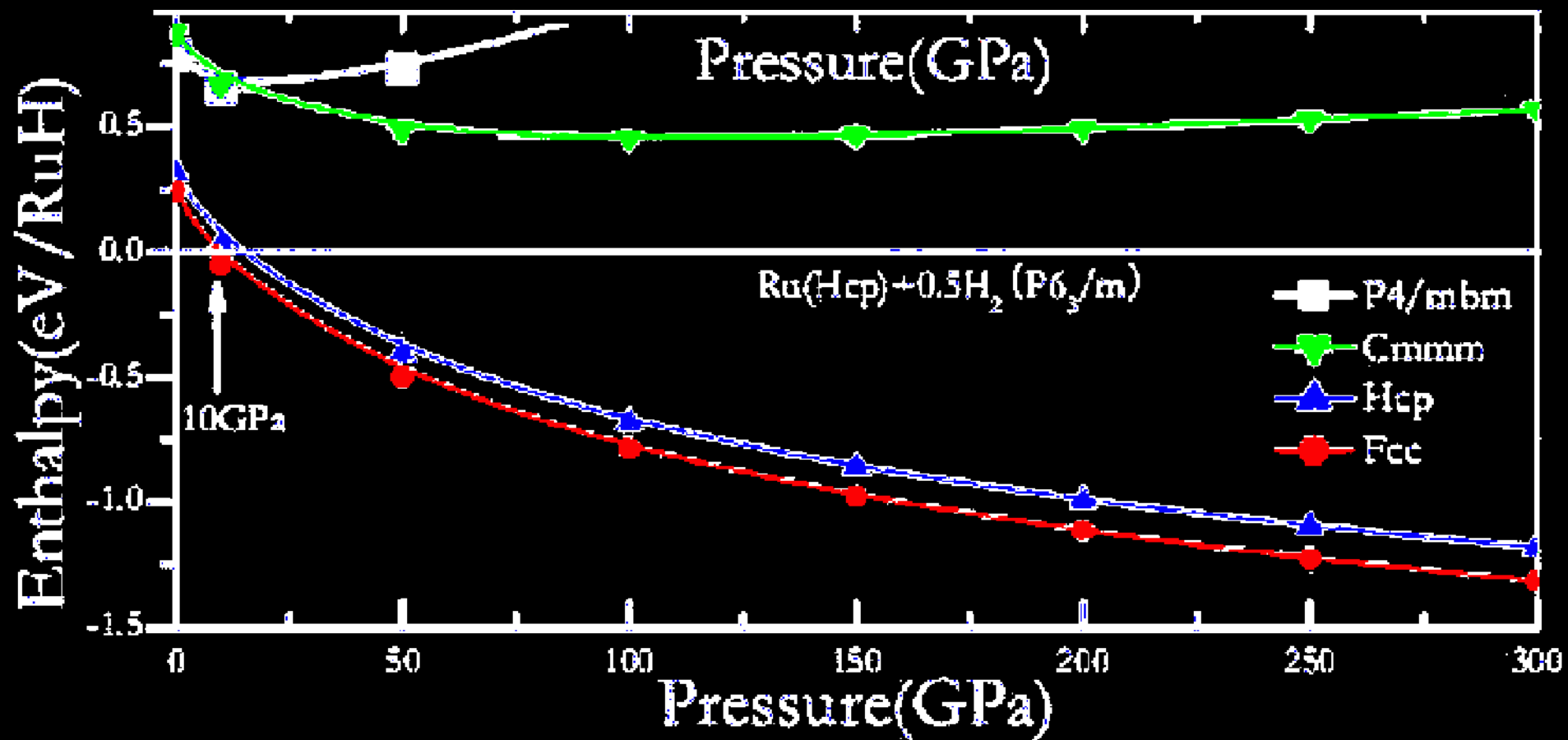
monohydrides

dihydrides

trihydrides

tetrahydrides

Ab-initio предсказание RuH



Ячейка с алмазными наковальнями для сжатия газов

Гайка поддержки поршня

Цилиндр

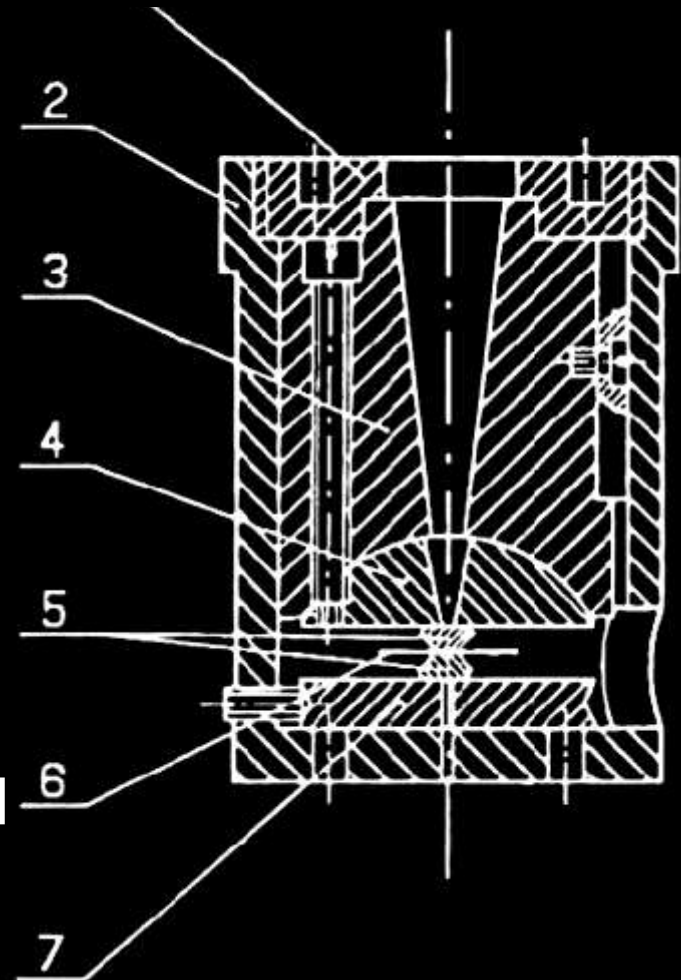
Поршень

Опорная плита

Алмазы

Прокладка из рения

Опорная плита



M. Tkacz. Polish J. Chem. 69 (1995) 1205.

Камера загрузки газов до 4 кбар

Подвижный поршень

Цилиндр

Поворотный механизм

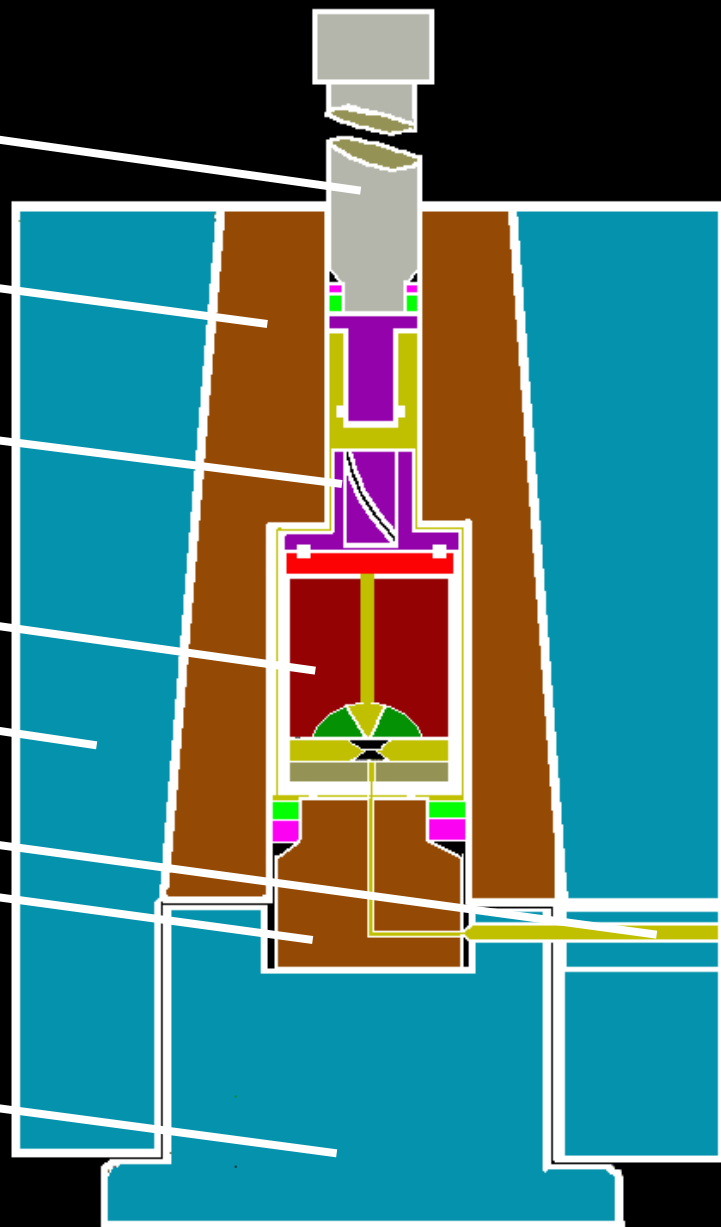
Ячейка с наковальнями

Стальная обойчатка

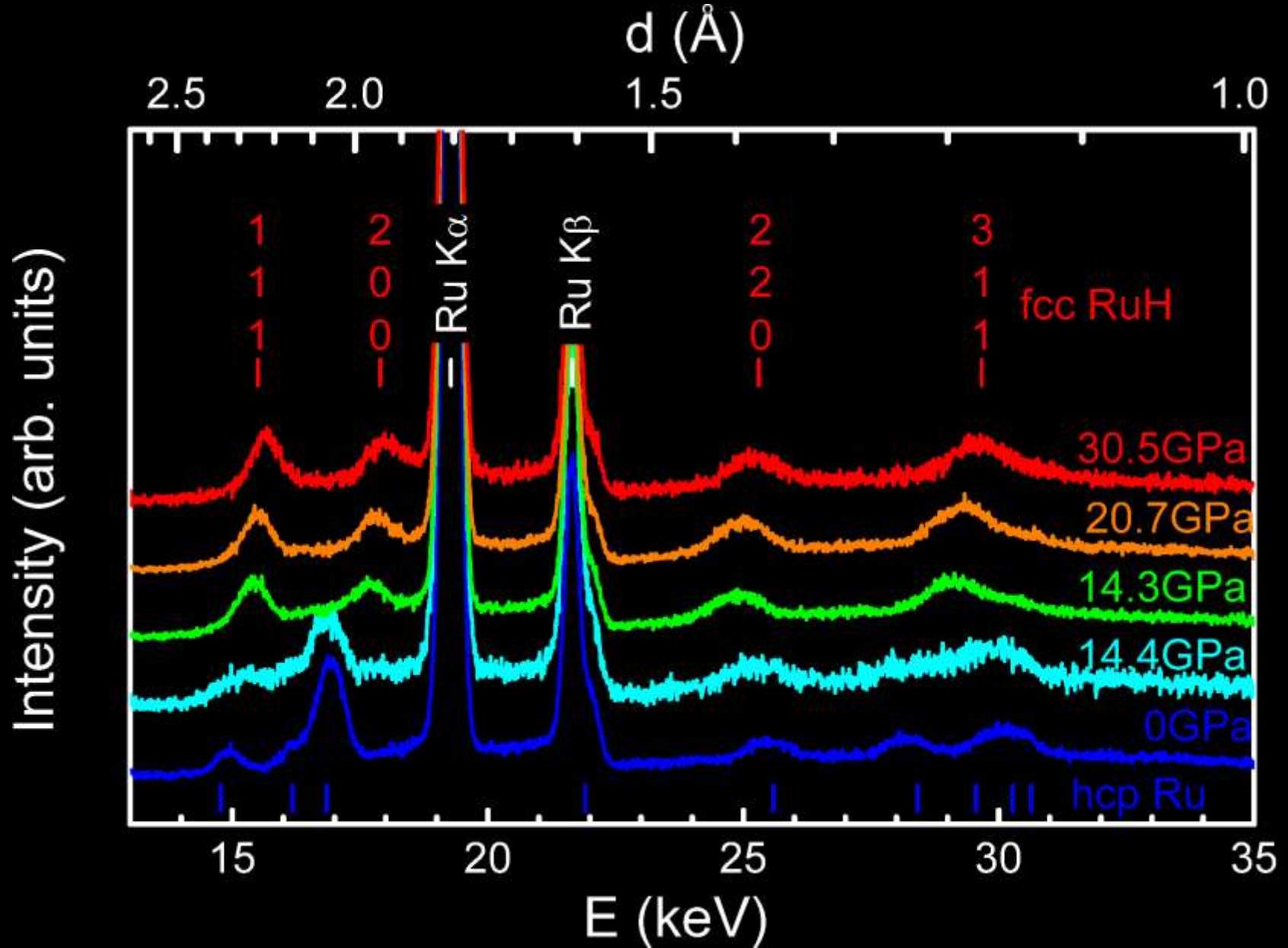
Впуск газа

Нижний поршень

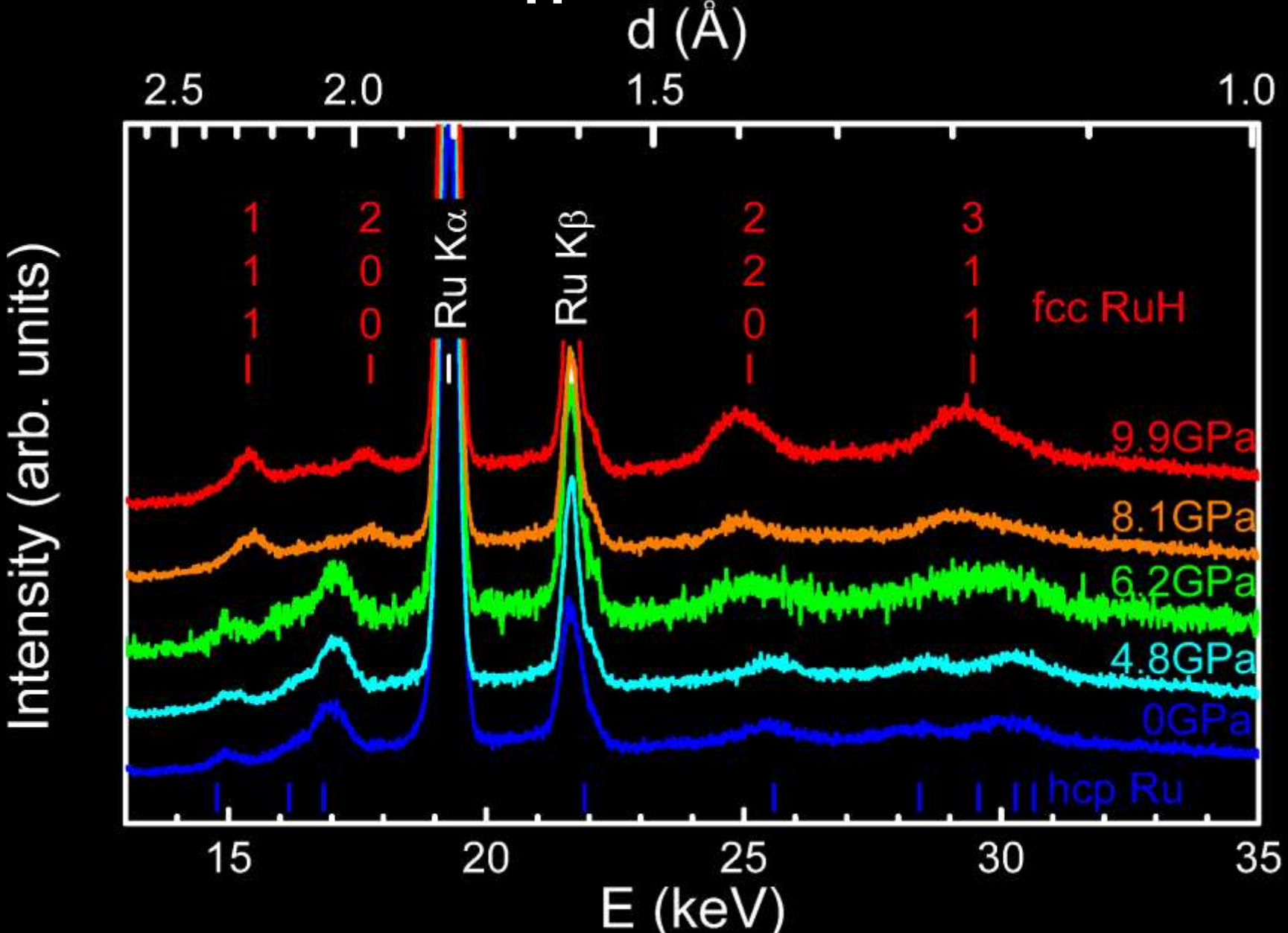
Поддержка поршня



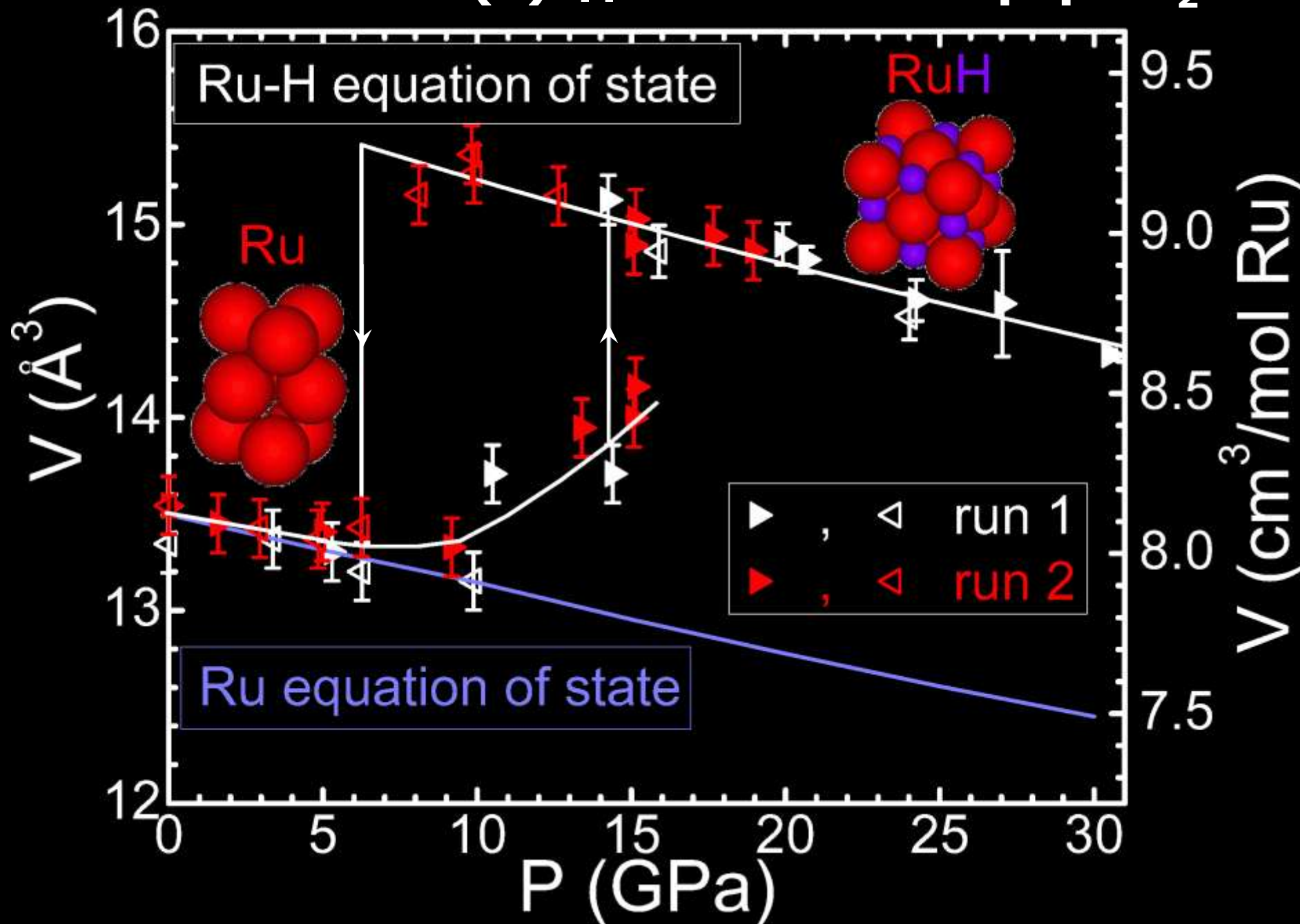
Энергодисперсионные дифракционные спектры Ru при сжатии в атмосфере H_2



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

$$\Delta G^0(\text{Ru} + \frac{1}{2}\text{H}_2 \rightarrow \text{RuH}) = \int_{P_{\text{eq}}}^{P_0} \Delta V dP = \int_{P_{\text{eq}}}^{P_0} (V_{\text{RuH}} - V_{\text{Ru}} - \frac{1}{2} V_{\text{H}_2}) dP \approx$$
$$\approx -(V_{\text{RuH}} - V_{\text{Ru}})P_{\text{eq}} + \frac{1}{2} \int_{P_0}^{P_{\text{eq}}} V_{\text{H}_2} dP \approx +37 \text{ kJ/mol}$$

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**