

УДК 662.769.21; 544-971; 54-19

АНАЛИЗ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК МЕТАЛЛОГИДРИДНЫХ СИСТЕМ ДЛЯ ХРАНЕНИЯ ВОДОРОДА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МОДИФИЦИРОВАННОЙ СХЕМЫ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ

В. В. Соловей,

д-р техн. наук

solovey@ipmach.kharkov.ua

ORCID: 0000-0002-5444-8922

А. Н. Авраменко,

канд. техн. наук

an0100@a.ukr.net

ORCID: 0000-0003-1993-6311

К. Р. Умеренкова,

канд. техн. наук

ORCID: 0000-0002-3654-4814

Институт проблем
машиностроения
им. А. Н. Подгорного
НАН Украины,
61046, Украина, г. Харьков,
ул. Пожарского, 2/10

Применение гидридов интерметаллических соединений (ИМС) для реализации рабочих процессов термосорбционных компрессоров, тепловых насосов, систем хранения, очистки и программируемой подачи водорода обусловлено рядом уникальных свойств этих сорбентов водорода. К ним, прежде всего, относится то, что насыщение ИМС с большой сорбционной емкостью происходит при сравнительно «мягких» термодинамических условиях, а также избирательность сорбционных процессов и наличие эффекта термодесорбционного активирования атомов и молекул изотопов водорода. Работа посвящена описанию фазовых равновесий в гидридах ИМС. Предложенный подход к проблеме расчета фазовых равновесий в металлогидридах состоит в определении свойств решетчатого газа атомов H и равновесной с ним молекулярной фазы H₂ в рамках единого метода – модифицированной теории возмущений. Термодинамическое описание водородной подсистемы в области неупорядоченных α-, β-фаз выполнено на базе модели неидеального (взаимодействующего) решетчатого газа атомов водорода. При этом учтены как прямое взаимодействие между атомами водорода, так и косвенные «деформационные» вклады в потенциальную энергию вследствие расширения решетки при растворении водорода. Моделирование фазовых переходов в системах ИМС–водород на базе модифицированной схемы теории возмущений дает правильное описание основных особенностей фазовых диаграмм в широком диапазоне давлений водорода. Из условия равенства химических потенциалов H-подсистемы гидрида и H₂-фазы (в расчете на атом H) получены уравнения, связывающие давление газообразной фазы H₂ с параметрами гидрида c и T (фазовые диаграммы). В предложенной вычислительной процедуре не используются подгоночные параметры или эмпирические корреляции, и она опирается на атомные характеристики водородной подсистемы и металлической матрицы, имеющие однозначный физический смысл. В качестве объекта исследования выбран гидрид интерметаллида LaNi₅. Особый интерес представляет положение критической точки β→α-перехода в системе LaNi₅–водород, для которой отсутствуют экспериментально полученные значения параметров. В работе приведены расчетные значения критических параметров β→α-перехода T_c=445 K, p_c=87 атм. Определенные расчетным путем данные о термодинамических параметрах α→β-перехода (энтальпия, энтропия и давление на плато изотерм) позволяют описать растворимость водорода в LaNi₅ при давлениях до 500 атм и хорошо согласуются с имеющимися в литературе экспериментальными данными.

Ключевые слова: водород, металлогидриды, интерметаллические соединения, фазовые диаграммы, решетчатый газ.

Введение

Математическое моделирование фазовых равновесий в системах «водород–металлогидриды» позволяет ограничить или исключить дорогостоящие и длительные экспериментальные исследования. Однако до недавнего времени методы расчета теплофизических свойств гидридов металлов и гидридов ИМС являлись в основном эмпирическими, что затрудняло проектирование и создание элементов металлогидридных систем, поскольку в таком случае невозможно прогнозировать их характеристики.

В статье [1], посвященной применению термодинамической теории возмущений для описания фазовых равновесий в гидридах металлов и ИМС, показано следующее. Модель неидеального решетчатого газа атомов водорода на базе метода теории возмущений позволяет воспроизводить основные особенности фазовых диаграмм систем ИМС–водород. Расчеты проведены в области неупорядо-

ченных α - и β -фаз на примере системы Pd–H₂. Полученные результаты для PCT-зависимостей (давление–состав–температура) этой системы согласуются с экспериментальными данными.

В настоящей работе предложенным методом определены сорбционные характеристики ИМС LaNi₅ с гексагональной структурой. Впервые построены диаграммы состояния системы LaNi₅–H₂ как в двухфазной области ($\alpha+\beta$), так и при сверхкритических параметрах.

Химический потенциал решеточного газа в гидридах ИМС

Предложенный подход к проблеме расчета фазовых равновесий в металлгидридах состоит в определении свойств решеточного газа атомов H и равновесной с ним молекулярной фазы H₂ в рамках единого метода – модифицированной теории возмущений (МТВ) [2, 3]. Термодинамическое описание водородной подсистемы в области неупорядоченных фаз проведено на базе модели неидеального решеточного газа атомов водорода. При этом учтены как прямое взаимодействие между атомами водорода, так и косвенные «деформационные» вклады в потенциальную энергию вследствие расширения решетки при растворении водорода.

Отметим важное обстоятельство: исходная кристаллическая структура ИМС в большинстве случаев не отличается от структуры металлической матрицы в гидридных фазах систем ИМС–водород в области неупорядоченных фаз.

В этом случае химический потенциал μ_H водородного компонента гидридов ИМС для базисного случая растворов внедрения с единственным типом эквивалентных междоузлий, при ограничении членами второго порядка теории возмущений, имеет вид [1]

$$\beta\mu_H^+(\theta, T) = \ln \frac{\theta}{1-\theta} + \frac{W_1\theta}{T(1+\alpha c_s\theta)} + \frac{W_2\theta^2}{T^2(1+\alpha c_s\theta)^2}, \quad (1)$$

где $\beta=1/kT$; $\mu_H^+ = \mu_H - \mu_H^{st}$; $\mu_H^{st}(T)$ – химический потенциал в стандартном состоянии [1]; $\theta=C/C_s$ – относительная концентрация водорода; $C=n_{\text{ИМС}}\cdot c$ – концентрация водорода в виде отношения H/ИМС, т.е. на формульную единицу ИМС; $n_{\text{ИМС}}$ – число атомов в формульной единице; c – концентрация водорода в единицах H/Me, т.е. на один атом матрицы; $\alpha=c^{-1}(\Delta V(c)/V)$ – коэффициент дилатации решетки ИМС при растворении водорода. Величины C_s [H/ИМС] – сорбционная емкость ИМС или максимальное число позиций внедрения H-атомов в исследуемой фазовой области; c_s [H/Me] – максимальная концентрация c , связаны соотношением $C_s=n_{\text{ИМС}}\cdot c_s$.

Постоянные W_1 и W_2 , обеспечивающие связь между макроскопическими свойствами растворов внедрения ИМС–водород и микроскопическими (атомными) характеристиками водородной подсистемы и металлической матрицы ИМС

$$W_1 = 2I_1n_M(\sigma_1^3/v_0)E_1c_s, \quad W_2 = (3I_2/4I_1^2)W_1^2, \quad (2)$$

где $I_1=-5,585$, $I_2=1,262$ – параметры МТВ для H-газа [1]; n_M – число атомов матрицы в элементарной ячейке; v_0 – объем ячейки при $C=0$; E_1 [K] и σ_1 [м] – параметры потенциала (H–H)-взаимодействия $u_H(r)=kE_1\phi(r/\sigma_1)$.

Границы областей α - и β -фаз системы LaNi₅–H₂

Для системы LaNi₅–H₂ в области α – β -равновесий максимальное количество абсорбированного водорода соответствует стехиометрическому составу LaNi₅H_{2,5}, т.е. значение $C_s=6,7$ ($c_s=1,2$). При параметрах (в Å) $a_0=5,015$, $c_0=3,987$ [4] элементарной ячейки LaNi₅, содержащей $n_M=n_{\text{ИМС}}=6$ атомов, ее объем $v_0=86,84\cdot 10^{-30}$ м³. При параметрах матрицы гидрида $a_x=5,426$, $c_x=4,269$ и значениях концентрации $c_x=c_s=1$ получим для коэффициента дилатации решетки LaNi₅ значение $\alpha\approx 2,9\cdot 10^{-30}$ [м³] $\cdot n_M/v_0=0,20$ [5].

Для комбинации $E_1\sigma_1^3$ в (2), отвечающей за энергию (H–H) притяжения водорода в LaNi₅H_x, как и в случае гексагональной решетки PdH_x [1], примем $E_1\sigma_1^3=0,45(E_1\sigma_1^3)_{\text{Pd}}$, где $(E_1\sigma_1^3)_0$ соответствует взаимодействию свободных H-атомов. Это дает значения постоянных величин $W_1=-2,52\cdot 10^3$ K, $W_2=1,93\cdot 10^5$ K².

Из выражения (1) получены значения температуры и концентрации водорода в критической точке α – β -равновесий [6] $T_c=-0,216\cdot W_1/(1+\alpha c_s)=445$ K, $C_c=\theta_c\cdot C_s=2,75$ H/LaNi₅ ($\theta_c=0,46/(1+0,54\alpha c_s)=0,41$). Дав-

ление в критической точке $p_{H_2}^{(c)}$ определено ниже. Экспериментальные сведения о положении критической точки α - β -равновесий в системе $\text{LaNi}_5\text{-H}_2$ до настоящего времени отсутствуют.

Ветви $C_i(T)=C_s \cdot \theta_i(T)$ кривой распада гомогенных фаз системы $\text{LaNi}_5\text{-H}_2$ на неупорядоченные фазы $i=\alpha, \beta$ определяются условиями равновесия

$$\begin{cases} p_H(\theta_\alpha, T) = p_H(\theta_\beta, T); \\ \mu_H^+(\theta_\alpha, T) = \mu_H^+(\theta_\beta, T), \end{cases} \quad (3)$$

где p_H – давление решеточного H-газа.

Границы двухфазной области ($\alpha+\beta$) определены из следствия условий (3) – правила равных площадей (ограниченных кривой $\mu_H^+(\tilde{\theta})$ и прямой $\mu_H^{+(PL)}$), которое при температуре $T < T_c$ выполняется в плоскости $(\mu_H^+ - \tilde{\theta})$ [1]

$$p_H^{(\beta)} - p_H^{(\alpha)} = \text{const} \int_{\tilde{\theta}_\alpha}^{\tilde{\theta}_\beta} [\mu_H^{+(PL)} - \mu_H^+(\tilde{\theta})] d\tilde{\theta} = 0. \quad (4)$$

Здесь переменная $\tilde{\theta} = \theta / (1 + \alpha c_s \theta)$; зависимости $A^{(PL)} = A^{(\alpha)}(T) = A^{(\beta)}(T)$, где $A^{(i)}(T) \equiv A(\theta_i, T)$ – значения функций $A = p_H, \mu_H^+$ на границах фаз $i=\alpha, \beta$, т.е. на «плато» давления и «плато» химического потенциала решеточного H-газа. Определив из (4) координаты $\tilde{\theta}_i(T)$, можно получить ветви кривой распада (СТ) $\theta_i(T)$, т.е. значения $\theta_i = \tilde{\theta}_i / (1 - \alpha c_s \tilde{\theta}_i)$, удовлетворяющие уравнениям (3).

Равновесное давление водорода в двухфазной области ($\alpha+\beta$)

Температурная зависимость $p_{H_2}^{(PL)}(T)$ – давления разложения гидридной β -фазы, т.е. давления водорода на «плато» изотерм $p_{H_2}(C)$ в гетерогенной фазовой области ($\alpha+\beta$), может быть представлена традиционным уравнением Вант-Гоффа

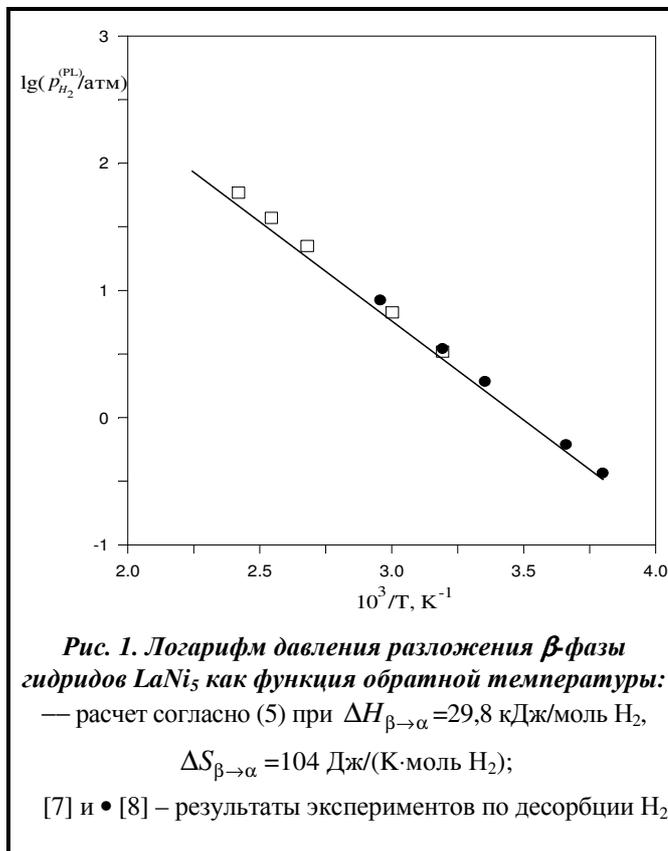
$$\ln p_{H_2}^{(PL)}(T) = -\frac{\Delta H_{\beta \rightarrow \alpha}}{RT} + \frac{\Delta S_{\beta \rightarrow \alpha}}{R}, \quad (5)$$

где параметры $\Delta H_{\beta \rightarrow \alpha}, \Delta S_{\beta \rightarrow \alpha}$, т.е. энтальпия и энтропия $\beta \rightarrow \alpha$ -перехода, в схеме МТВ имеют вид

$$\begin{aligned} \Delta H_{\beta \rightarrow \alpha} &\cong H_{H_2}^0 + 2RT\Delta_{\beta \rightarrow \alpha} \\ \Delta S_{\beta \rightarrow \alpha} &\cong S_{H_2}^0 - 2R\Delta_{\beta \rightarrow \alpha} \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь $H_{H_2}^0, S_{H_2}^0$ – энтальпия и энтропия H_2 в стандартном состоянии идеального газа, величина $\Delta_{\beta \rightarrow \alpha}(T) = \beta(h_H^{+(\alpha)} - h_H^{+(\beta)}) / (\theta_\beta - \theta_\alpha)$ соответствует относительной разности удельной энтальпии h_H решеточного H-газа $h_H^{(i)}(T) \equiv h_H^{st}(T) + h_H^+(\theta_i, T)$ на границах гомогенных фаз $\theta_\alpha(T)$ и $\theta_\beta(T)$.

Для рабочего диапазона α - β -равновесий гидрида, как и ранее [2], определим параметры (6) в критической точке $\beta \rightarrow \alpha$ -перехода. Исходя из выражений для энтальпии неидеального решеточного H-газа [6] и для критической концентрации $\theta_c = 0,46 / (1 + 0,54\alpha c_s)$, для системы $\text{LaNi}_5\text{-H}_2$ ($\theta_c = 0,41$) получим



$$-\Delta_{\beta \rightarrow \alpha}^{(c)} = \left. \frac{\partial(\beta h_H^+)}{\partial \theta} \right|_{\substack{T=T_c \\ \theta=\theta_c}} = \frac{1}{\theta_c(1-\theta_c)} + \frac{1}{\theta_c^2} \left[\ln(1-\theta_c) - \frac{0,63}{1+\alpha c_s} \right],$$

откуда $\Delta_{\beta \rightarrow \alpha}^{(c)} = 2,3$. Для параметров $\beta \rightarrow \alpha$ -перехода в интервале температур от 263 К до $T_c = 445$ К согласно (6) при $\Delta_{\beta \rightarrow \alpha} = 2,3$ имеем значения $\Delta H_{\beta \rightarrow \alpha} = 29,8$ кДж/моль H_2 , $\Delta S_{\beta \rightarrow \alpha} = 104,0$ Дж/(К·моль H_2).

Зависимость давления разложения β -фазы гидридов $LaNi_5$ от обратной температуры, полученная из выражения (5), сравнивается на рис. 1 с данными экспериментов по десорбции водорода [7] и [8], проведенных в ограниченных рабочих диапазонах температур.

Из уравнения (5) при $T=T_c$ для системы $LaNi_5-H_2$ можно получить значение давления в критической точке α - β -равновесий: $p_{H_2}^{(c)} = 87$ атм. Экспериментальные данные об этом параметре отсутствуют.

Водородосорбционные свойства $LaNi_5$ в одно- и двухфазной областях при давлениях до 500 атм

Фазовые диаграммы, связывающие давление p_{H_2} молекулярного водорода с параметрами c , T гидрида, могут быть получены из условия равенства химических потенциалов решеточного H -газа $\mu_H(c, T)$ и газообразной фазы H_2 $\mu_{H_2}(p_{H_2}, T)$, в расчете на атом H

$$\frac{1}{2} \mu_{H_2}(p_{H_2}, T) = \mu_H(c, T). \quad (7)$$

Если при заданных c , T происходит разложение β -фазы гидрида ИМС на α -твердый раствор и H_2 , на РСТ-диаграммах в двухфазной области ($\alpha+\beta$) появляются «плато», т.е. отрезки постоянного давления $p_{H_2}^{(PL)}(T)$, положение которых можно определить из равенства

$$\frac{c_\beta - c_\alpha}{2} \beta \mu_{H_2}^{(PL)} = \beta (h_{MH}^{(\beta)} - h_{MH}^{(\alpha)}) - (s_{MH}^{(\beta)} - s_{MH}^{(\alpha)}), \quad (8)$$

где $\mu_{H_2}^{(PL)} \equiv \mu_{H_2}(p_{H_2}^{(PL)}, T)$ – химический потенциал H_2 на «плато»; $\beta h_{MH}^{(x)} \equiv H_{MH}(c_x, T)/RT$, $s_{MH}^{(x)} \equiv S_{MH}(c_x, T)/R$ – удельные энтальпия и энтропия гидрида на границах фаз $c_i(T) = c_s \theta_i(T)$. После преобразований равенств (7) и (8) для зависимостей $p_{H_2}(\theta, T)$, пересекающих одно- и двухфазные области гидридов ИМС, получим

$$\ln p_{H_2}(\theta, T) = \ln p_{H_2}^{(PL)}(T) + 2\beta[\mu_H^+(\theta, T) - \mu_H^{+(PL)}(T)], \quad (9)$$

где $p_{H_2}^{(PL)}(T)$ – давление разложения β -фазы; $\mu_H^{+(PL)}(T)$ – высота «плато» на концентрационных зависимостях изотерм $\mu_H^+(\theta)$, определяемая условиями фазового перехода газ-жидкость в водородном компоненте гидрида, т.е. в решеточном H -газе.

Выражение (9) при $\theta < \theta_\alpha$ и $\theta > \theta_\beta$ описывает нисходящие и восходящие ветви изотерм $p_{H_2}(C)$ соответственно, а при $\theta_\alpha < \theta < \theta_\beta$ дает значение $p_{H_2}^{(PL)}(T)$ согласно уравнению Вант-Гоффа (5).

Для РСТ-зависимостей выше критической точки α - β -равновесий, с учетом поправки в $\mu_{H_2}(p_{H_2}, T)$ за счет второго вириального коэффициента H_2 можно получить

$$\ln p_{H_2}(\theta, T) + 0,18 \frac{p_{H_2}(\theta, T)}{T} = Q + \frac{\Delta \Phi_{H_2}^0(T)}{R} + 2\beta[\mu_H^+(\theta, T) - \mu_H^{+(c)}], \quad (10)$$

где $\Delta \Phi_{H_2}^0(T) = \Phi_{H_2}^0(T) - \Phi_{H_2}^0(T_-)$; величины $Q = \ln p_{H_2}^{(c)} + 0,18 p_{H_2}^{(c)}/T_c$, $\Phi_{H_2}^0(T) = -G_{H_2}^0(T)/T$; $G_{H_2}^0$ – энергия Гиббса в состоянии идеального газа; давление водорода p_{H_2} задано в атм, температура T – в К.

Фазовая диаграмма системы $LaNi_5-H_2$ в виде набора изотерм растворимости водорода при температурах ниже T_c рассчитана согласно выражению (9), а в закритической однофазной области $T \geq T_c$ – согласно выражению (10).

Полученные результаты приведены на рис. 2 в сравнении с результатами экспериментов по десорбции водорода [7, 8]. Там же показаны расчетные зависимости при повышенных температурах и давлениях до порядка 500 атм, когда в вириальном разложении химического потенциала газообразных фаз водорода допустимо ограничиться членом со вторым вириальным коэффициентом B_{H_2} . Экспериментальные данные о растворимости водорода в $LaNi_5$ в этой области состояний отсутствуют. При критической температуре $\mu_H^{+(c)} = \mu_H^{+(PL)}(T_c)$, $\Delta\Phi_{H_2}^0 = 0$, и оба выражения (9) и (10) описывают критическую изотерму $p_{H_2}(\theta, T_c)$ $LaNi_5$ 445 К (172,6 °С) с точкой перегиба $C_c = 2,75$ H/ $LaNi_5$; $p_{H_2}(\theta_c, T_c) \equiv p_{H_2}^{(c)} = p_{H_2}^{(PL)}(T_c) = 87$ атм.

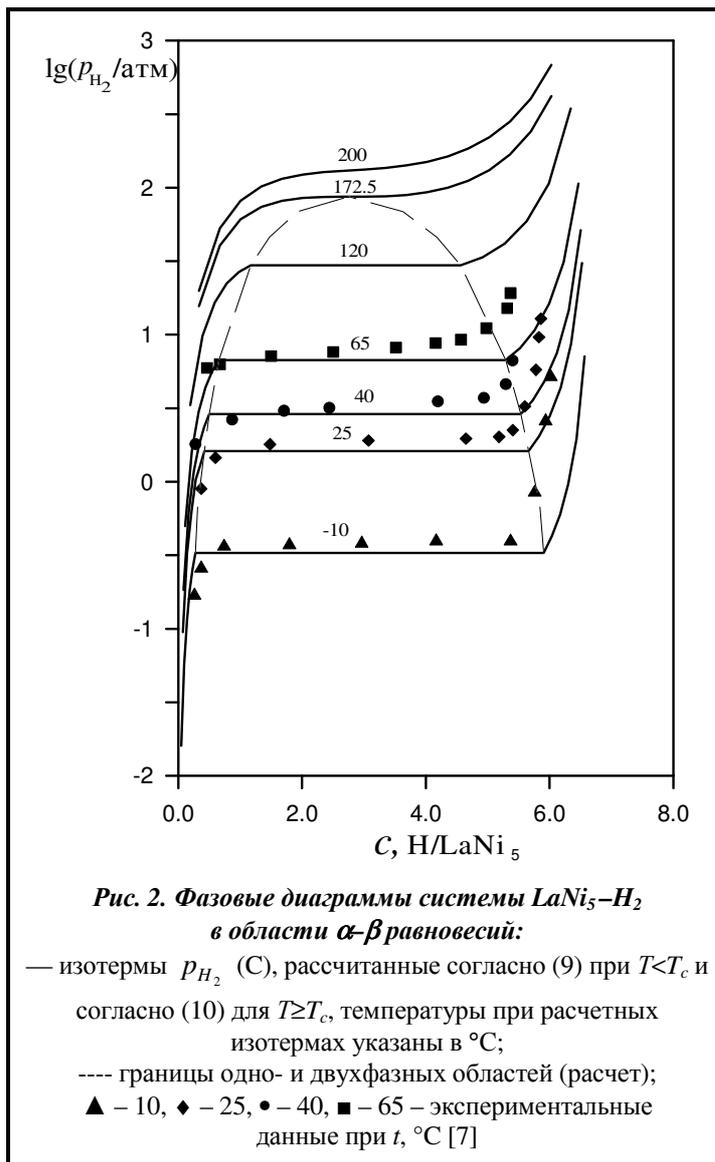
Приведенные на рис. 1, 2 результаты позволяют заключить, что модель неидеального решеточного газа для водородной подсистемы гидридов ИМС обеспечивает корректное описание основных особенностей РСТ-диаграмм системы $LaNi_5-H_2$ в области неупорядоченных фаз в широком диапазоне давлений. Отличие расчетных значений от экспериментальных не превышает 7 % при определении величины давления в зависимости от температуры в двухфазной области и 12 % – при вычислении значений энергии фазового перехода.

Заключение

Применение теории возмущений для определения термодинамических свойств неидеального решеточного газа атомов водорода позволяет моделировать фазовые равновесия в гидридах ИМС в области неупорядоченных фаз. Рассчитанные энтальпия и энтропия $\beta \rightarrow \alpha$ -перехода в системе $LaNi_5-H_2$ и давление на плато изотерм растворимости хорошо согласуются с имеющимися экспериментальными данными. Кроме того, получены данные о водородсорбционных свойствах $LaNi_5$ при повышенных температурах и давлениях. Экспериментальные данные в этой области состояний отсутствуют. Предсказано положение критической точки $\beta \rightarrow \alpha$ -перехода и поведение изотерм растворимости водорода в закритической области при давлениях до порядка 500 атм.

Литература

1. Marinin V. S., Umerenkova K. R., Shmalko Yu. F., Lobko M. P., Lototsky M. V. Interacting lattice gas model for hydrogen subsystem of metal hydrides. *Functional materials*. 2002. Vol. 9. No. 3. P. 395–401.
2. Marinin V. S., Shmalko Yu. F., Umerenkova K. R. Description of phase equilibria in intermetallic compounds within the perturbation theory. *Hydrogen Materials Sci. and Chemistry Carbon Nanomaterials*. 2006. P. 187–192. https://doi.org/10.1007/978-1-4020-5514-0_23
3. Маринин В. С. Теплофизика альтернативных энергоносителей. Харьков: Форт, 1999. 212 с.
4. Яртысь В. А., Бурнашева В. В., Семененко К. Н. Структурная химия гидридов интерметаллических соединений. *Усп. химии*. 1983. Т. 52. № 4. С. 529–562.
5. Водород в металлах: в 2-х т. (под ред. Г. Алефельда и И. Фёлькия). Мир, 1981. Т. 1. 475 с., т. 2. 430 с.



6. Shmalko Yu. F., Marinin V. S., Umerenkova K. R. Phase equilibriums in "hydrogen – metallic hydride" systems. Kharkov: KNU–IMBP, 2007.
7. Van Mal H. H. Stability of ternary hydrides and some applications. *Philips Research Reports Suppl.* 1976. No. 1. P. 1–88.
8. Biris A., Bucur R. V., Ghete P., Indrea E., Lupu, D. The solubility of deuterium in LaNi_5 . *J. Less Common Metals.* 1976. Vol. 49. P. 477–482. [https://doi.org/10.1016/0022-5088\(76\)90059-X](https://doi.org/10.1016/0022-5088(76)90059-X)

Поступила в редакцію 09.04.2019

Аналіз термодинамічних характеристик металогідридних систем для зберігання водню з використанням модифікованої схеми теорії збурень

В. В. Соловей, А. М. Авраменко, К. Р. Умеренкова

Інститут проблем машинобудування ім. А.М. Підгорного НАН України,
61046, Україна, м. Харків, вул. Пожарського, 2/10

Застосування гідридів інтерметалічних сполук (ІМС) для реалізації робочих процесів термосорбційних компресорів, теплових насосів, систем зберігання, очищення і програмованої подачі водню обумовлено низкою унікальних властивостей цих сорбентів водню. Це, перш за все, те, що насичення воднем ІМС з великою сорбційною ємністю відбувається за порівняно «м'яких» термодинамічних умов, а також вибірковість сорбційних процесів і наявність ефекту термодесорбційного активування атомів і молекул ізотопів водню. Робота присвячена опису фазових рівноваг в гідридах ІМС. Запропонований підхід до проблеми розрахунку фазових рівноваг в металогідридах полягає у визначенні властивостей решіткового газу атомів водню і рівноважної з ним молекулярної фази в рамках єдиного методу - модифікованої теорії збурень. Термодинамічний опис водневої підсистеми в області неупорядкованих α - β -фаз виконано на базі моделі неідеального (взаємодіючого) решіткового газу атомів водню. Водночас враховано як пряму взаємодію між атомами водню, так і непрямі «деформаційні» вклади в потенціальну енергію внаслідок розширення решітки під час розчинення водню. Моделювання фазових переходів в системах ІМС-водень на базі модифікованої схеми теорії збурень дає правильний опис основних особливостей фазових діаграм в широкому діапазоні тисків водню. За умови рівності хімічних потенціалів H-підсистеми гідриду та H_2 -фази (в розрахунку на атом H) отримані рівняння, що зв'язують тиск газоподібної фази H_2 з параметрами гідриду c і T (фазові діаграми). В запропонованій обчислювальній процедурі не використовуються підгінні параметри або емпіричні кореляції, і вона спирається на атомні характеристики водневої підсистеми та металевої матриці, що мають однозначне фізичне значення. Як об'єкт дослідження обрано гідрид інтерметаліду LaNi_5 . Особливий інтерес викликає розташування критичної точки $\beta \rightarrow \alpha$ -переходу в системі LaNi_5 – водень, для якої відсутні значення параметрів, отриманих експериментально. В роботі наведені розрахункові значення критичних параметрів $\beta \rightarrow \alpha$ -переходу $T_c=445$ К, $p_c=87$ атм. Визначені розрахунковим шляхом дані про термодинамічні параметри $\alpha \rightarrow \beta$ -переходу (ентальпія, ентропія і тиск на плато ізотерм) дають можливість окреслити межі розчинності водню в LaNi_5 за тисків до 500 атм та добре узгоджуються з наявними в літературі експериментальними даними.

Ключові слова: водень, металогідриди, інтерметалеві сполуки, фазові діаграми, решітковий газ.