**Моделирование сплавов для многоступенчатого термосорбционного компрессора водорода.**

***Прохоренков М.А.***

*Аспирант 3 года обучения*

*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,*

*Химический факультет, Москва, Россия*

*E–mail: mikl1995@yandex.ru*

Развитие альтернативных источников энергии и, в частности, водородной энергетики предопределило повышенный интерес к веществам, способным эффективно аккумулировать и компримировать водород. Для этого наиболее актуальными являются ИМС (интерметаллические соединения). На сегодняшний день с появлением композитных баллонов высокого давления требуется и разработка низкотемпературного термосорбционного компрессора водорода.

Целью данной работы было моделирование и исследование водородсорбционных свойств многокомпонентных металлических сплавов от низкого до высокого давления на основе структурных типов AB2 и AB5, пригодных для использования в металлогидридном компрессоре водорода и для хранения водорода.

В настоящей работе для расчёта свойств ранее не исследованных ИМС была применена разработанная в нашей лаборатории статистическая модель, использующая уже известные литературные данные термодинамических параметров реакций абсорбции-десорбции водорода интерметаллическими композициями структурных типов AB2 и AB5.

С использованием статистической модели прогноза были рассчитаны водородсорбционные термодинамические параметры сплавов от низкого до высокого давления. Сплавы были синтезированы и охарактеризованы методом РФА и EDX, и для них были построены изотермы абсорбции и десорбции водорода. Проведено сравнение расчетных и экспериментальных термодинамических параметров для оценки корректности работы модели прогноза.

Исследование выполнено по Программе развития Междисциплинарной научно-образовательной школы МГУ им. М.В. Ломоносова «Будущее планеты и глобальные экологические изменения» и поддержано Министерством науки и высшего образования Российской Федерации, проектами # АААА-А16-116053110012-5 и 122012400186-9.