

CrH₂

1928

V 335

Sleverts $\checkmark$ and Gotta $\checkmark$
2.Z.anorg. Chem. 172, 1, (1928)

31

$ZnCl_2$ aq, hf

Cr_7H_2 Δ HF

Circ. 500

1965

CrH

22 В6. Получение и свойства гидрида хрома. Про-
скурников А. А., Крылов Е. И. «Ж. неорган. хи-
мии», 1965, 10, № 5, 1017—1021

Проведенным исследованием влияния состава электро-
лита и условий электролиза (катодной плотности тока,
т-ры) на растворимость водорода в электролитически
осажденном Cr показано, что CrH практически точного
стехиометрич. состава можно получить из электролита:
400 г/л CrO_3 , 400 г/л $\text{Na}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$, 4 г/л H_2SO_4 . Исследованы
микроструктура, устойчивость и магнитная восприимчи-
вость CrH. Опытное значение эффективного момента
атома хрома в его гидриде, равное 1,77 μ_B , может быть
объяснено на основании теории кристаллич. поля.

Резюме авторов

X.1965.22

CrH_{0,84}

ВФ-226-VII

1966

1Ср

6 E590. Удельная электронная теплоемкость и λ -аномалии $\text{CrH}_{0,84}$. Albrecht G., Wolf G. Spezifische Elektronenwärme und λ -Anomalie von $\text{CrH}_{0,84}$. «Phys. status solidi», 1966, 18, № 2, K119—K122 (нем.)

При помощи адиабатич. калориметра исследована температурная зависимость молекулярной теплоемкости C_p в интервале t -р 12—85° К на образцах гидрида хрома $\text{CrH}_{0,84}$. Измерения C_p показали, что при 66° К наблюдается аномалия в изменении молекулярной теплоемкости. Коэф. электронной теплоемкости определялся из диаграммы. При допущении, что при $T < 20^\circ \text{K}$ $C_p = C_v$ результаты измерений хорошо удовлетворяют уравнению $C_v/T = aT^2 + \gamma$. Коэф. электронной теплоемкости $\gamma = (2,45 + 0,05) \cdot 10^{-3}$ кал/моль · град². Обсуждаются результаты измерений с позиций электронно-фононного взаимодействия.

П. Храмов

м. 1967. 68

CrH_{0.84}

1966

BQP - 226 - VII

Cp

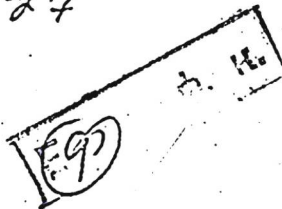
6300c Electronic specific heat and λ -anomaly of CrH_{0.84}.
G. Albrecht and G. Wolf (Friedrich-Schiller Univ., Jena, Ger.).
Phys. Status Solidi 18(2), 119-22(1966)(Ger); cf. CA 65: 1634g.
From C_p measured for CrH_{0.84} at 12-85°K. in an isothermal
calorimeter, the d. of states at the Fermi energy limit ($N^d(E_F)$)
was calcd. to be <2.2 states/ev.-atom. This value suggests
exchange enhancement of the susceptibility. The exptl. values
conform to $C_v/T = aT^2 + (2.45 \pm 0.05) \times 10^{-3}$, where the last
term is the coeff. of electronic heat, γ , in cal./mole-degree². A
 λ -anomaly occurs near 66°K., perhaps from magnetic ordering
below this temp.

Elizabeth W. Baumann

C.A. 1967-67-2

$C_2H_5NH_2^+(J)$; $AP(C_6H_3^+; C_6H_5^+;$ V. 13998
 $CNH_4^+; NH_4^+; CNH_3^+; CNH_2^+; NH_3^+)$ 1964
 $\Delta H_f(C_6NH_6^+); \Delta(C-H) \text{ u } \Delta(N-H) (P_{\text{uonne}}$
 $C_2NH_6^+); \Delta H_f[(CNH_4^+); (C_6H_5^+); (CNH_3)^+]$
Collin J. S., Fran-skin M. J., Hyatt D.
Bull Soc. Roy Sci. Liège, 1967, 36,
N5-6; 318-27

10 M



PX 1968
195 129

Cr H₂ *

VII-5928

1970

8 E369. Фазовый анализ и анализ состава ^{гидрида} хрома. Stock Allen D., Hardcastle Kenneth I. Phase and composition analysis of chromium hydride. «J. Inorg. and Nucl. Chem.», 1970, 32, № 4, 1183—1186 (англ.)

С помощью хроматографического и рентгеноструктурного анализа исследованы структура и состав фаз и построена фазовая диаграмма системы Cr—H в интервале конц-ции CrH_0 — $\text{CrH}_{1.0}$. Установлено существование трех

ф. 1970.

82

фаз: 1) α -фаза — твердый раствор водорода в металлич. Сг — имеет ОЦК-решетку, параметр которой увеличивается с ростом содержания растворенного Н (Сг $a = 2,884 \pm 0,002$ Å; СгН_{0,08} $a = 2,888$ Å): 2) β -фаза образуется при Сг/Н $\simeq 1$, имеет гексаг. решетку с $a = 2,722$ Å и $c = 4,436$ Å. В образцах β -фазы обнаружено присутствие новой фазы с ГЦК-решеткой ($a = 3,7$ Å), по-видимому, представляющей собой стабилизированный β -Сг; 3) γ -фаза также образуется при Сг/Н $\simeq 1$, но имеет ГЦК-решетку с $a = 3,853$ Å. Образуется ли β - или γ -фаза, зависит как от содержания Н в исходном образце, так и от способа приготовления образцов. И. Д. Марчукова

10313.8774
Ch, Ph

Bp-6081-VII

1970

CrH_x (18087)
(Cr)

Wolf G.

Specific heat of chromium hydride CrH_x
from 11 to 300 °K.

"Phys. status solidi (a)", 1971, 5, N 3,
627-632

(англ., рез.ком.)

0431 ПИК

414 416 4 22

ВИНИТИ

CrH

1971

1 23 Б814. Давление разложения гидрида хрома при 150°. Baranowski Bogdan, Bojarski Krzysztof. The decomposition pressure of chromium hydride at 150° C. «Rocz. chem.», 1971, 45, № 3, 499—500 (англ.; рез. польск.)

Кр
Образцы электрохимически полученного хрома помещались в бронзовый цилиндр и выдерживались при $t = 150^\circ$ в течение нескольких недель. Равновесное давл. водорода передавалось через клапан Бриджмена и наполненный маслом капилляр на манганиновый манометр. Обнаружено, что в интервале состава $H/Cr = 0,2-0,6$ равновесное давл. водорода составляет 3160 ± 140 ат.

П. М. Чукуров

X. 1974. 23

CrH

VII-6080

1971

4, 5 f
4 S

23 Б768. Энтропия, свободная энергия образования и давление разложения гидроксида хрома. Wolf G. The entropy and free energy of formation and the decomposition pressure of chromium hydride. «Z. phys. Chem.» (DDR), 1971, 246, № 5—6, 403—406 (англ.)

По лит. данным рассчитана свободная энергия образования CrH $\Delta G^0_{298} = 3976 + 350$ кал/моль и изменение энтропии $\Delta S^0_{298} = 24,81 + 0,1$ э. е. С использованием известных термодинамич. ур-ний рассчитано давл. разложения при 298°K $P = 600 + 200$ ат. П. М. Чукуров



X.1971.23

CrH_x

VII-6080

1971

(54265g) Entropy and free energy of formation and the decomposition pressure of chromium hydride. Wolf, Gert (Inst. Phys. Chem., Bergakad. Freiberg, Freiberg, E. Ger.). *Z. Phys. Chem. (Leipzig)* 1971, 246(5-6), 403-6 (Eng). The title data on CrH_x ($x = \text{approx. } 1$) were calcd. and the H pressure for the thermodynamic equil. between gaseous H and Cr hydride was estd. As investigations of the systems Pd-H and Ni-H have shown that the absorption and desorption isotherms are not identical and that the decompn. pressure corresponds to the equil. pressure, and similar results are to be expected for Cr hydride, the calcd. equil. pressure is equal to the decompn. pressure of CrH_x .

Friedrich Epstein

C.H. 1971 #58

CrH_x

1971

12 E620. Теплоемкость гидроида хроиа CrH_x от 11 до 300° K. Wolf G. Specific heat of chromium hydride CrH_x from 11 to 300° K. «Phys. status solidi (a)», 1971, 5, № 3, 627—632 (англ.; рез. нем.)

Приведены результаты измерений теплоемкости CrH_x ($x=0,84$; 0,91 и 0,94). Плотность электронных состояний вблизи поверхности Ферми, найденная из данных о коэф. электронной теплоемкости, согласуется с результатами магн. исследований. Обсуждается природа λ -образной аномалии теплоемкости. Библ. 16. Резюме

Ф. 1971. 128

CrH_x

1971

/ 24 Б876. Теплоемкость гидрида хрома CrH_x от 11 до 300° K. Wolf G. Specific heat of chromium hydride CrH_x from 11 to 300° K. «Phys. status solidi (a)», 1971, 5, № 3, 627—632 (англ.; рез. нем.)

Ср
Калориметрически определена теплоемкость CrH_x (x=0,84; 0,91 и 0,94) в области т-р 11—300° K. Приведены значения C_p , $H^0 - H_0^0$ и S^0 . Стандартные энтропии указанных гидридов соотв., равны 8,98; 8,06 и 8,20 (±0,03) э. е. Определены значения коэф. электронной теплоемкости. Зависимость теплоемкости от т-ры про-

являет аномальный характер, что объясняется переходом антиферромагнетик — парамагнетик. С. А. Ивашин

X-1971-24

CrH_x

1991

54236v Specific heat of chromium hydride CrH_x from 11 to 300°K. Wolf, G. (Inst. Phys. Chem., Bergakad. Freiberg, Freiberg, Ger.). *Phys. Status Solidi A* 1971, 5(3), 627-32 (Eng). Measurements are presented of the sp. heat of CrH_x ($x = 0.84$; 0.91 ; and 0.94) at 11-300°K. From the γ -coefficients of the electronic sp. heat, the d. of states at the Fermi level is calcd. and compared with the same quantity resulting from magnetic investigations. A λ -anomaly in the temp. slope of C_p is obsd. and discussed.

Cp

C. H. 1991. 45. 8

CrH

1972

2 Б766. Свободная энергия образования гидроида хро-
ма. Вагапowski Bogdan, Воjarski Krzy-
sztof. Free energy of formation of chromium hydride.
«Rocz. chem.», 1972, 46, № 7—8, 1403—1409 (англ.; рез.
польск., рус.)

Определено давл. H_2 над тв. гексагон. гидридом хро-
ма CrH (I), равное 3160 ± 1500 атм при 150° и $710 \pm$
 ± 90 атм. при 25° . Станд. термодинамич. потенциал об-
разования I $\Delta G^\circ_{298} = 4130 \pm 80$ кал/моль H_2 и станд.
энтальпия образования I $\Delta H^\circ_{298} = -3270 \pm 110$ кал/моль
 H_2 . Б. Г. Пожарский

ΔG°_{298}
 ΔH°_{298}

X. 1973. N2 .

CrH

1972

144669n Free energy of formation of chromium hydride. Baranowski, Bogdan; Bojarski, Krzysztof (Inst. Chem. Fiz., Polska Akad. Nauk, Warsaw, Pol.). *Rocz. Chem.* 1972, 46(7/8), 1403-9 (Eng). Equil. pressure of H over CrH was measured at 150° and free energy of formation calcd. as $\Delta G^\circ = 4130 \pm 80$ cal/mole H_2 . Std. enthalpy of formation was $\Delta H^\circ = -3270 \pm 110$ cal/mole H_2 . The free energy was calcd. from the value of a plateau in equil. pressure observed in the region of coexistence of 2 phases. The stability of CrH under std. conditions is attributed to the considerable activation energy connected with the change in structure.

Irena Kloczko

ΔG_f° ;
 ΔH_f° ;

C.A. 1972. 77. N22.

Cr Hx

Baranowski B.

1972

Ber. kernforschungsanlage
Jülich, 1972, Conf. 6
(Vol. 1), 37

Kp

Δ Gf

X. 1972. 18

Re Ni Hx , I

Cr-H
система

(ΔH); ΔS

1973

4 Б611. Термодинамика твердых растворов переходных металлов с водородом. Arpoult William J., McLellan Rex B. Thermodynamics of transition metal-hydrogen solid solutions. «Acta met.», 1973, 21, № 10, 1397—1403 (англ.; рез. франц., нем.)

Измерена т-рная зависимость р-римости водорода в хроме и вольфраме. В системах Cr-H (т-ра 750—1350°) и W-H (т-ра 897—1467°) отношение Н/металл в указанных т-рных интервалах $7,35 \cdot 10^{-5}$ — $13,2 \cdot 10^{-5}$ и $3,54 \cdot 10^{-5}$ — $33,1 \cdot 10^{-5}$, соотв. Парц. мол. энтальпия $\Delta \bar{H}$ (ккал/моль) и энтропия (э. е.) р-рения водорода в хроме 11,36 и —6,54, в вольфраме 4,98 и —9,38, соотв. Обсуждается связь между $\Delta \bar{H}$ р-рения и моделью экранированного протона в тв. р-рах водород — металл.
Б. Г. Пожарский

X1974N4

(+1) ☒

H-Cr (растворимость)

1974

9 E621. Термодинамический анализ равновесия в системах переходный металл шестой группы — водород при высоких температурах. Аварбэ Р. Г., Мазеев А. А. «Ж. физ. химии», 1974, 48, № 5, 1126—1130

Исследована растворимость H_2 в W при т-рах до $3100^\circ K$ и p_{H_2} до 25 атм. На основании предложенной модели дан термодинамич. анализ равновесия в системах H—Cr, H—Mo и H—W. Показано, что термодинамич. ф-ции атомов H, растворенных в решетке переходных металлов 6-й группы, определяются разностью ΔE_{me-n} в растворе при $0^\circ K$ и в молекуле H_2 при 1 атм. и $0^\circ K$ и частотой колебаний растворенных атомов H.

Резюме

сп. 1974 № 5

(+2)

1974

CrH

(451)

65171u Calorimetric measurements of the heat of hydrogen desorption from nonstoichiometric chromium hydrides. Randzio, Stanislaw; Bojarski, Krzysztof (Inst. Phys. Chem., Pol. Acad. Sci., Warsaw, Pol.). *Rocz. Chem.* 1974, 48(7-8), 1375-8 (Eng). The heat of decompn. of nonstoichiometric Cr hydride [12789-06-9] was measured at 298° K. Av. heat of decompn. was 3.83 ± 0.45 kcal/mole H_2 . The entropy of CrH [13966-79-5] formation was calcd. as 25.9 ± 2.5 cal/mole°K.

I. Kloczko

C.A. 1975 82, N10

1975

CrH_x

14 Б903. Системы Cr—H и Cr—D в области высокого давления. Baranowski B., Wojarski K., Tkacz M. Cr—H and Cr—D systems in the high pressure region. «Rev. Phys. Chem. Jap.», 1975, Spec. Issue, 577—579 (англ.)

При $t_{\text{ре}} 150^\circ$ измерено равновесное давл. H_2 над гидридами Cr с ат. отношениями H/Cr 0,2—1,0, полученными электрохим. методом. В двухфазной области системы Cr—H плато давл. соответствует 3220 ± 150 бар, откуда рассчитаны станд. свободная энергия образования гидроида $\Delta G^\circ = 17300 \pm 300$ дж/моль H_2 и энтальпия разложения $\Delta H = -15100 \pm 2600$ дж/моль H_2 . Равновесное давл. H_2 над гидридом Cr при 25° составляет 720 ± 90 бар. В спец. установке высокого давл. исследована зависимость электросопротивления Cr при р-рении в нем H или D от давл. последних. Резкий рост сопро-

(ΔH, ΔG)

X1976 N 14

тивления, свидетельствующий об образовании гидрида или дейтерида Сг, наблюдался при 18100—18000 атм. Для завершения образования давл. повышалось до >23000 атм. Показано, что образование дейтеридов происходит значительно медленнее, чем гидридов. Гидрид $\text{СгН}_{\sim 0,9}$ при t -ре 150° и давл. Н_2 23000 атм образуется за ~ 4 часа, а дейтерид такого же состава — за 3-е суток. Периоды гексагон. плотноупакованной решетки гидрида Сг составляют a 2,717; c 4,436, а дейтерида — a 2,710; c 4,427 Å. Давл. образования гидрида и дейтерида Сг составляют, соотв. 17 800—18 500 и 18 400—18 900 бар, что обусловлено различием летучестей Н_2 и D_2 при одном и том же давлении. В. Нешпор

CrH_x

1975

CrD_x

7 E670. Исследование систем Cr—H и Cr—D в условиях высоких давлений. Baґanowski B., Bojarski K., Tkacz M. Cr—H and Cr—D systems in the high pressure region. «Rev. Phys. Chem. Jap.», 1975, Spec. Issue, 577—579 (англ.)

(ΔG_f)

Измерено давление диссоциации гидроида хроиа (препарат получен электролитич. методом) при 150°С и рассчитаны термодинамич. ф-ции: $\Delta G_f = (17300 \pm 300)$ дж/моль H₂ и $\Delta H_f = (-15100 \pm 2600)$ дж/моль H₂. Равновесное давление при этой т-ре составляет (3220 ± 150) бар. Результаты использованы для осуществления синтеза гидроида и дейтрида хроиа из элементов в условиях высоких давлений. Проведено исследование синтезированных препаратов различными физич. методами. Отмечено существование изотопного эффекта.

Б. Могутнов

ф. 1975
N 7

CrH_{0.97}

1975

84: 11572y Low-temperature magnetic susceptibility of chromium hydride. Hanson, M.; Khan, H. R.; Knoedler, A.; Raub, Ch. J. (Dep. Phys., Chalmers Univ. Technol., Goteborg, Swed.). *J. Less-Common Met.* 1975, 43, 93-5 (Eng). Magnetic susceptibility data are presented for CrH_{0.97}, at 1.4-100°K. Results are compared with specific heat data for the same sample at 2-10°K. CrH_{0.97} is paramagnetic with a susceptibility that is higher than that of pure Cr and strongly increasing at low temps. The present work, and earlier elec. resistivity data, show that CrH_{0.97} has metallic properties which, in many respects, are similar to those of Pd.

(Cp, Ttr)

C.A. 1976 84 N2

Bp-1553-XVII

1975

CrH_{0,97}

1 E383. Теплоемкость CrH_{0,97} при низких температурах. Viswanathan R., Khan H. R., Knoedler A., Raub Ch. J. Low-temperature heat capacity of CrH_{0,97}. «J. Appl. Phys.», 1975, 46, № 9, 4088—4089 (англ.)

(Cp)

Измерения проведены в интервале t -р 1,7—10° К. Использован метод периодич. нагрева исследуемого и эталонного (Cu) образцов излучением лазера. Выше 4° К результаты описываются ф-лой $C = \gamma T + \beta T^2$. Коэф. электронной теплоемкости $\gamma = 4,5$ мдж/г·моль. К², т-ра Дебая найдена равной 360° К. Проведено сравнение с литературными данными для CrH_{0,34} и Cr.

Ф/1976 N1

ВФ-1553-XVII

СгН_{0,97}

3 Б1013. Низкотемпературная теплоемкость СгН_{0,97}.
 Viswanathan R., Khan H. R., Knoedler A.,
 Raub Ch. J. Low-temperature heat capacity of СгН_{0,97}.
 «J. Appl. Phys.», 1975, 46, № 9, 4088—4089 (англ.)

1975

В вакуумном дифференциальном калориметре, на-
 гретом двумя лазерными лучами одной интенсивно-
 сти в интервале 1,7—9,9 К измерена теплоемкость
 СгН_{0,97}. Выше 4 К результаты аппроксимированы
 ур-нием: $C/T = 4,5 + 0,042 T^2$ мдж/моль·град К₂ ($\Theta_D = 360$ К)
 с отклонениями в пределах $\pm 3\%$. Ниже 3,5 К наблю-
 далась аномалия в виде горба неясной природы, не
 связанная со сверхпроводимостью, т. к. измерения со-
 противления и индуктивности того же образца не пока-
 зали перехода к сверхпроводимости до 1,5 К.

С. В. Мицкевич

(C_p)

1 1976 №3

Bp-1553-XVII

1975

CrH_{0.97}

169305c Low-temperature heat capacity of chromium hydride (CrH_{0.97}). Viswanathan, R.; Khan, H. R.; Knoedler, A.; Raub, Christoph J. (Brookhaven Natl. Lab., Upton, N. Y.). *J. Appl. Phys.* 1975, 46(9), 4088-9 (Eng). The low-temperature (1.7-10°K) heat-capacity of CrH_{0.97} [13966-79-5] prepd. by an electrochem. method is given. The electronic heat-capacity coeff. γ and the Debye temp. θ_D are 4.5 mJ/gmole°K² and 360°K, resp. These results are compared with the available literature data on Cr and CrH_{0.84}.

Cp, Dg

e. H. 1975. 83 N20

~~CrH_{0,97}~~

CrH_{2,97}

ВФ XVII-2362

1976

7 Б755. Свойства гидрида хрома. Khan H. R.,
Raub Ch. J. Properties of chromium hydride. «J.
Less—Common Metals», 1976, 49, 399—406 (англ.)

Гидрид CrH_{0,97} (I) с периодами решетки a 2,717 Å,
 c/a 1,628 получен электролитич. осаждением из р-ра
CrO₃ в H₂SO₄. При низких T -рах T -ная зависимость
электросопротивления (ρ) I подчиняется закону $\rho \sim T^2$,
что обусловлено преимущественным рассеянием s -элек-
тронов проводимости на спиновых флуктуациях (пара-
магнонах) в d -полосе. I не переходит в сверхпроводя-
щее состояние до T -ры $7 \cdot 10^{-3}$ К. В интервале T -р 100—
300 К I имеет повышенную не зависящую от T -ры маг-
нитную восприимчивость, обусловленную сильным пара-

(Cr)

x 1977 N 7

магнетизмом Паули, к-рая заметно возрастает с понижением т-ры < 10 К. При 20 К $\chi \approx 5 \cdot 10^{-5}$ cgsu/T. Измерение уд. теплоемкости I (при т-рах до 10 К) показали, что коэф. электронной теплоемкости $\gamma = 4,5$ мдж/моль $\cdot$ К² (что соответствует плотности состояний 0,96 состояний/эв на 1 атом Сг), а дебаевская т-ра $\theta = 360$ К (по сравнению с $\gamma = 1,4$ мдж/моль $\cdot$ К², $\theta = 630$ К для чистого Сг). Аномалия теплоемкости I при очень низких т-рах связана с антиферромагнитным упорядочением. Электронное строение I близко к такому в Рд и характеризуется высокой плотностью состояний вблизи уровня Ферми.

В. Нешпор

CrH_{0.97}

BP-XVII-2362 1976

(Cr)
85: 183143w Properties of chromium hydride. Khan, H. R.;
Raub, C. J. (Forschungsinst. Edelmet. Metallchem., Schwaebisch
Gmuend, Ger.). *J. Less-Common Met.* 1976, 49, 399-406
(Eng). Measurements of the low-temp. elec. resistivity, magnetic
susceptibility, and heat capacity, were made on a nonstoichiometric
chromium hydride sample of the compn. CrH_{0.97}, prepd. by an
electrochem. method. A T^2 -dependence of the elec. resistivity
was obsd. in the low-temp. region, indicating an s-electron-par=
amagnon scattering to be the dominant factor contributing to the
elec. resistivity. Heat capacity data show a high value of the
electron d. of states, $(N(E_F) = 0.96 \text{ states/electron volt/Cr atom})$
and a much softer lattice as compared with pure Cr metal.
Magnetic data show a strongly-enhanced Pauli spin susceptibility
and a pronounced d. of d-states at the Fermi level, assocd. with
a peak at or near the Fermi level. Results of these measurements
suggest that CrH_{0.97} is metal-like and that its electronic
structure is similar to that of pure Pd metal.

C.H. 1976. 85 N24

См Нх

1976

1 23 В7. Образование и разложение гидрида хрома при температурах до 400°C и давлениях водорода до 20 кбар. Понятовский Е. Г., Белаш И. Т. «Докл. АН СССР», 1976, 229, № 5, 1171—1173

Методом измерения электросопротивления исследованы условия образования и разложения гидрида хрома (I) в интервале т-р от -50 до 400° и давл. водорода 0—20 кбар. Показано, что при атмосферном давлении I, полученный в результате прямого воздействия водорода высокого давления на металлич. хром, термически менее устойчив, чем I, получаемый электролитич. методом.

Авторыферат

сформирован
и разложен

X 1976 № 23

Cz Mx

1978

Baranowski B.

обзор.

свойства

раз. высокого
давления

Hydrogen Metals. 2.

Appl.-Oriented Properties, Berlin e.a.,
1978, 157-200.

(see. Ni Mx ; ~~II~~ I).

CrH₂

NiH₂

(Ttr)

(+1) ☒

89: 207859v Electron-phonon interaction in transition metal hydrides. Kulikov, N. I. (Inst. Fiz. Vys. Davlenii, Troitsh, USSR). *Fiz. Tverd. Tela (Leningrad)* 1978, 20(8), 2279-82 (Russ). The electron-phonon interaction const. was calcd. in the rigid muffin tin approxn. with exptl. information about the phonon spectrum of the d-metal hydrides and calcns. of the band structures performed earlier. A prediction was made about high crit. temps. of the superconducting transitions in CrH₂ and NiH₂.

1978

C.A., 1978, 89, N24

Обзор:

Сх Нх

фазовая
диагр.

(+2)



Л. 1949, N 3

1948

З Б795. Переходные металлы VI—VIII групп при высоком давлении водорода. Понятовский Е. Г., Антонов В. Е., Белаш И. Т. «Изв. АН СССР. Неорганические материалы», 1978, 14, № 9, 1570—1580

Обзор работ по системам металл—водород при высоком давл., выполненных по 1972 г., а также работ авторов за 1975—1977 гг. Приведены фазовые диаграммы систем Cr—H, Ni—H, Ni—D, Ni—Fe—H. Библ. 37.
В. А. Трифонов

1979

CrH₂
NiH₂(T_c)

90142302g Band structure and electronic properties of transition metal hydrides. Kulikov, N. I. (Inst. High Pressure Phys., Troitsk, USSR). *Phys. Status Solidi B* 1979, 91(2), 753-62 (Eng). A calcn. of band structures, densities of states, and Fermi surfaces for 3d-element hydrides is made. The results are compared with the APW calcn. by A. C. Switendick (1971, 1972) and the exptl. measured values of electronic sp. heat, magnetic susceptibility, and optical absorptivity. By using the G. D. Gaspari-V. L. Gyorffy theory (1972), values of the electron-phonon coupling const. and T_c are calcd. High crit. temps. of supercond. are predicted for Cr and Ni dihydrides.

(+1)



C.A. 1979, 90, N18

$\text{Cr}_{0,50}\text{H}_{0,50}$

Common 9992 1980

Bouten P. C. P. et al

(ΔH_f)

7. Less-Common Metals
1980, 41, 147-60

гидрид Cr

1985

13 БЗ023. Образование гидрида при очень высоком давлении водорода. Hydride formation at very high hydrogen pressure. Drissen A., Hemmes H., Griesen R. «Z. Phys. Chem.» <BRD>, 1985, 143, 145—159 (англ.; рез. нем.)

Термодинамика образования гидридов металлов описана исходя из станд. молярной теплоты образования (ΔH°) гидридов. Из лит. эксперим. данных, полученных при высоких давл. H_2 , с использованием приближения ср. поля для модели решеточного газа и ур-ния состояния для H_2 , действительного в интервале т-р 100—1000 К и давл. до 100 ГПа, определены значения ΔH° для гидридов Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Mo, Tc, Rh, Al. Оценены плато давл. для большинства еще не исследованных систем металл—водород, лежащие за пределами интервала давл., обычно достигаемых в аппаратах высокого давл. Показано, что в пределах интервала давл., реализуемых в ячейке с алмазной наковальней, могут быть синтезированы гидриды Be, Cu, Ru, Ag, Cd, In, W, Re, Pt и Hg. В. Ф. Байбуз

ΔH_f ;

(78)

X/1986, 19, N13.

гидрид Mn

1985
Gr Mx Filipek S.; Baranowski B.
6 Int. Symp.: High-Purity
Water. Sci. and Technol.,
Dresden, May 6-10, 1985.
Proc. 1: Plenary Pap./Prepa-
rat. Oberlung-Witz, 1985,
90-106. ●

(ex. Ni Hx; I)

GH⁺

[Om. 25171]

1986

Mandich M. L., Steiger-
wald M. L., et al.,

ASH, Do

J. Amer. Chem. Soc.,
1986, 108, N20, 6197-6202.

LiH-

1990

113: 138905g Electron propagator calculations on the ionization energies of hydrochromate(1-), hydromanganate(1-), and hydroferrate(1-) (CrH^- , MnH^- and FeH^-). Lin, Jyh Shing; Ortiz, J. V. (Dep. Chem., Univ. New Mexico, Albuquerque, NM 87131 USA). *Chem. Phys. Lett.* 1990, 171(3), 197-200 (Eng). Electron-propagator calens. with UHF ref. states yield the ionization energies of CrH^- , MnH^- , and FeH^- . Spin contamination in the anionic ref. states is small, enabling the use of second- and third-order self-energies in the Dyson equation. Feynman-Dyson amplitudes for these ionizations are essentially identical to canonical spin-orbitals. For most of the final states, these consist of an antibonding combination of an sp metal hybrid, polarized away from the hydrogen, and hydrogen s functions. In one case, the Feynman-Dyson amplitude consists of nonbonding d functions. Calcd. ionization energies are within 0.5 eV of expt.

J. pacem

(42) 17

C. A. 1990, 113, N 16

ВНХ

1991

3 E534. Система Cr—H (хром—водород). The Cr—H (chromium—hydrogen) system / Venkatraman M., Neumann J. P. // J. Phase Equilibria .— 1991 .— 12 , № 6 .— С. 672—677 .— Англ.

Приведен участок диаграммы состояния от 4 ат.% H; отмечается ненадежность эксперим. данных, использованных для построения. Из кривых растворимости H в твердом Cr при давл. $P_H = 1$ бар следует, что растворимость при $T < 700$ °C не описывается экстраполяцией данных от более высоких т-р, хотя результаты разных авторов при $T < 700$ °C не совпадают. Приведены кристаллич. структуры CrH и CrH₂, а также параметры гексаг. решетки CrH, определенные рентгенографическим и нейтронографич. методами. Отмечается, что области стабильности CrH и CrH₂ надежно не установлены. На

Cr при $T < 800$ K



Ф 1993, № 3

основании измерения теплоемкости при $T < 300\text{K}$ определены коэф. электронной теплоемкости для CrH_x ($0,91 \leq x \leq 0,97$). Кратко описаны магн. свойства и поведение системы при высоких давлениях водорода. Библ. 59. Е. З. С.

CrH₂

1991

653115. Система Cr—H (хром—водород). The Cr-H (chromium-hydrogen) system /Venkatraman M., Neumann J. P. //J. Phase Equilibria .—1991 .—12 ,№ 6 .—С. 672—677 .—Англ.

Обзор. Обобщены лит. данные по фазовым соотношениям в системе Cr—H. В системе образуются три гидроида при повышенном давл. H₂, CrH, CrH₂ и CrH₃, причем сведения о последнем мало достоверны. Р-римость H₂ в тв. Cr описывается соотношением $\lg (\text{ат.Н}) = 1,970 - 5330/T(\text{К})$, а в жидк. Cr — $\lg (\text{ат.}\% \text{Н}) = 0,130 - 2620, /T(\text{К})$ при давл. 1 бар. Приведена часть фазовой диаграммы Cr—H (при т-рах 1700—2000 К и 0—4 ат% H₂). Приведены кристаллографич., термодинамич. и магн. х-ки гидридов. Библ. 59. Л. Г. Титов

термодинамический
характер.

х. 1993, N 6

Cr H

1993

Chen Yu-Min, Clemmer
D.E. et al.

Kp, Do

J. Chem. Phys. 1993. 98,
N6.C. 4929-4936.

( cer. VH; I)

CrH

07. 42266

1997

Vincenzo Barone, Carlo Adamo

First-row transition-metal hydrides:
a challenging playground for new
theoretical approaches

Quantum Chemistry, Vol. 62. 443-458
(1997)

1998

F: CrH[2+]

P: 3

22B1318. Электронная структура ScH{++}, TiH{++}, VH{++}, CrH{++}
и MnH{++}. The electronic structure of ScH{++}, TiH{++}, VH{++},
CrH{++}, and MnH{++} / Harrison James F., Christopher Peter S. // 53rd
Ohio State Univ. Int. Symp. Mol. Spectrosc., Columbus, Ohio, June 15-19,
1998. - [Columbus (Ohio)], 1998. - C. RG13. - Англ.

921X, 1998, 1/22

ABSTRACT

A self-consistent hybrid Hartree-Fock/density functional method was validated by computing a number of properties for the whole series of neutral and cationic hydrides of first-row transition metals. The binding energies for the cationic species are significantly improved with respect to those provided by standard density functionals, reaching an accuracy comparable to that of the most sophisticated post-Hartree-Fock approaches. The results are slightly worse for neutral species, although the improvement with respect to conventional density functionals is still significant. At the same time, the computed bond lengths and dipole moments are in remarkable agreement with the available experimental data. © 1997 John Wiley & Sons, Inc.