

Absorpce a skladování vodíku v pevných látkách NFPL218

Jakub Čížek – katedra fyziky nízkých teplot

Tel: 221 912 788

jakub.cizek@mff.cuni.cz

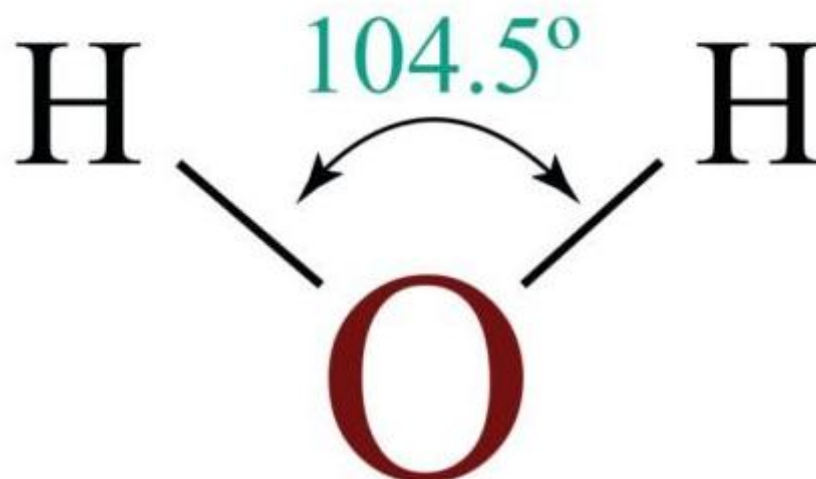
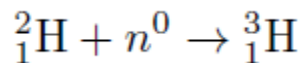
<https://physics.mff.cuni.cz/kfnt/vyuka/Absorpce-H/index.html>

Doporučená literatura:

- G. Alefeld, J. Völkl, Hydrogen in Metals I, Basic Properties, Springer-Verlag, Berlin 1978
- G. Alefeld, J. Völkl, Hydrogen in Metals II, Application-Oriented Properties, Springer-Verlag, Berlin 1978
- A. Pundt, R. Kirchheim, Hydrogen in Metals, Microstructural Aspects, *Annu. Rev. Mater. Res.* **36** (2006) 555-608
- A. Züttel, A. Remhof, A. Borgschulte, O. Friedrichs, Hydrogen: the future energy carrier, *Phil. Trans. R. Soc. A* **368** (2010) 3329-3342
- D.J. Durbin, C. Malardier-Jugroot, Review of hydrogen storage techniques for on board vehicle applications, *Int. J. Hydrogen Energy* **38** (2013) 14595-14617
- J. Ren, N. M. Musyoka, H. W. Langmi, M. Mathe, S. Liao, Current research trends and perspectives on materials-based hydrogen storage solutions: A critical review, *Int. J. Hydrogen Energy* **42** (2017) 289-311
- P. Modi, K.-F. Aguey-Zinsou, Room Temperature Metal Hydrides for Stationary and Heat Storage Applications: A Review, *Front. Energy Res.* **9** (2021) 616115
- R.R. Shahi, A.K. Gupta, P. Kumari, Perspectives of high entropy alloys as hydrogen storage materials, *Int. J. Hydrogen Energy* **48** (2023) 21412-21428

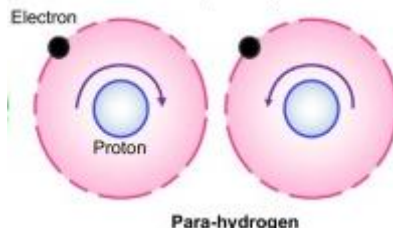
Vodík

- **Vodík (Hydrogenium – H)**
- nejhojnější prvek ve vesmíru (> 90 at.%, ≈ 75 wt.%)
- třetím nejhojnější prvek na Zemi.
- atomární vodík se nachází například v obalu hvězd
- na Zemi je zastoupen téměř výhradně ve formě sloučenin (voda, uhlovodíky atd.).
- Většina energie na Zemi pochází z vodíku, díky jaderné fúzi $\text{H} + \text{H} \rightarrow \text{He}$ probíhající a Slunci
- **Molekula vodíku H_2**
- Vodík je bezbarvý, lehký plyn, bez chuti a zápachu



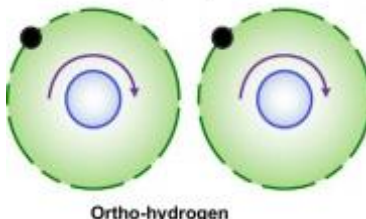
Molekula vodíku

- **para – vodík (p-H₂)**
- singletní stav (žádný nespárovaný elektron)
- celkový spin $S = 0$
- projekce spinu: $m_s = 0$

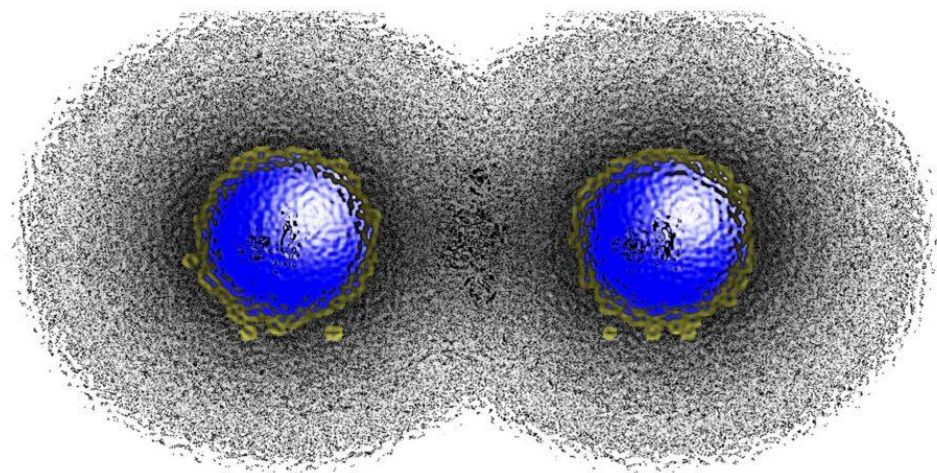
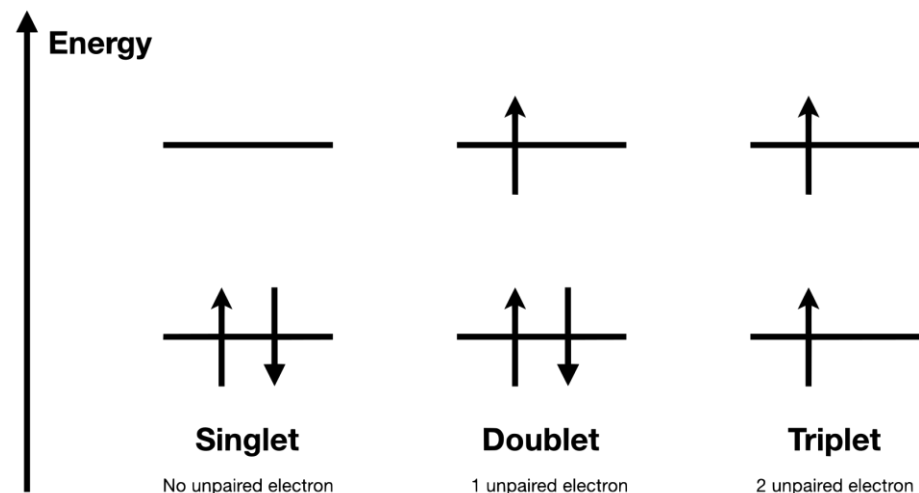


$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow) \quad \left. \vphantom{\frac{1}{\sqrt{2}}} \right\} s = 0 \quad (\text{singlet})$$

- **ortho – vodík (o-H₂)**
- tripletní stav (dva nespárované elektrony)
- celkový spin $S = 1$
- projekce spinu: $m_s = -1, 0, 1$



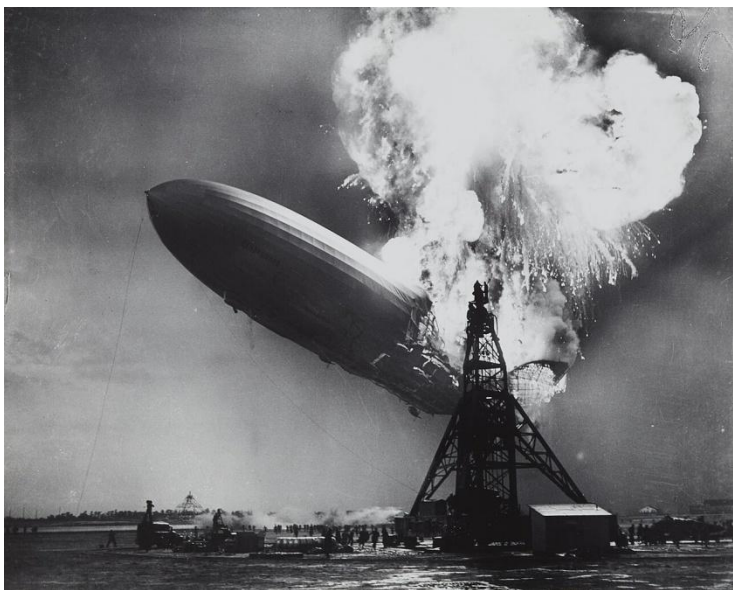
$$\left. \begin{aligned} |1, 1\rangle &= \uparrow\uparrow \\ |1, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow) \\ |1, -1\rangle &= \downarrow\downarrow \end{aligned} \right\} s = 1 \quad (\text{triplet})$$



Vodík – chemické vlastnosti

- **Chemické vlastnosti vodíku**

- velmi reaktivní prvek atomární prvek $\text{H} + \text{H} \rightarrow \text{H}_2$
- vytváří sloučeniny se všemi prvky periodické soustavy kromě inertních plynů
- vysoce hořlavý $2\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{H}_2\text{O}$ (uvolněná enthalpie 286 kJ/mol)
- vodík tvoří hořlavou směs se vzduchem v rozmezí koncentrací 4 – 94%
- vodík tvoří výbušnou směs se vzduchem v rozmezí koncentrací 18.3 – 59%



- teplota samovznícení vodíku ve vzduchu: 500°C

Hindenburg 6.5. 1937, NAS Lakehurst, New Jersey

Vodík – chemické vlastnosti

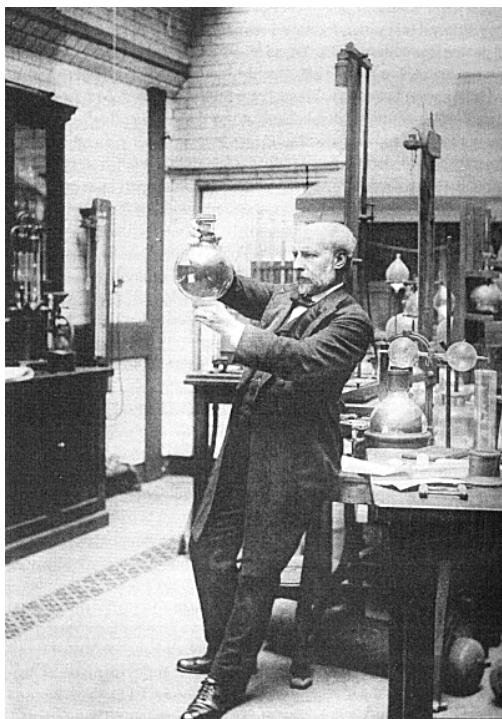
• Chemické vlastnosti vodíku

- hořlavá směs se vzduchem v rozmezí koncentrací 4 – 94%
- výbušná směs se vzduchem v rozmezí koncentrací 18.3 – 59%
- nízká zápalná energie 20 mJ
- únik vodíku není možné rozpoznat lidskými smysly
- vodík tvoří výbušnou směs i s fluorem a chlorem
- vodík se snadno rozptyluje
- při hoření vodíku nevznikají žádné toxické zplodiny
- menší destrukční účinky při havárii



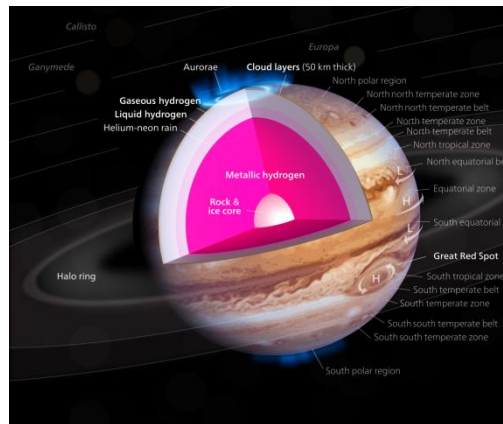
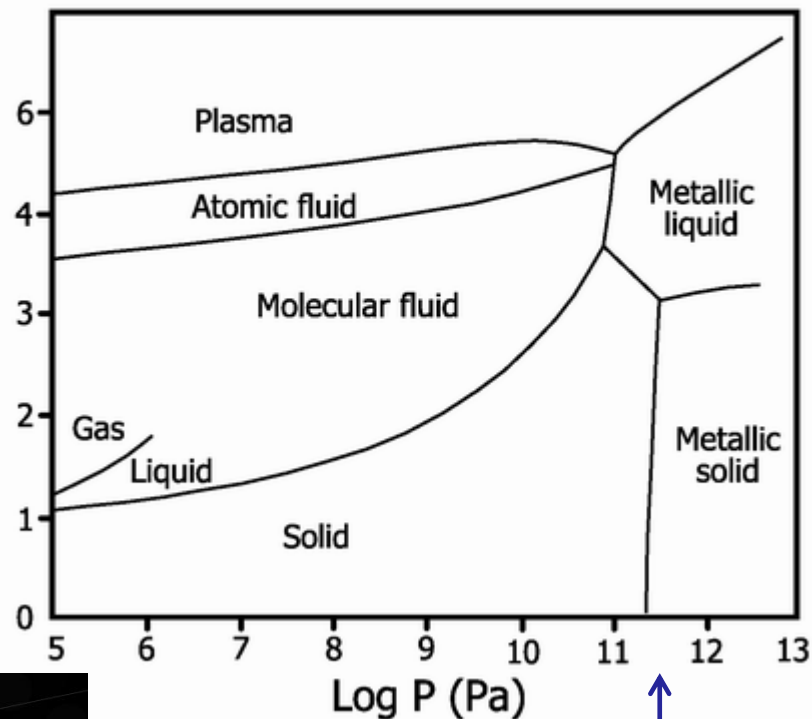
Vodík - fáze

- fáze vodíku
- kritický bod 33 K
- při atmosférickém tlaku:
 - teplota varu vodíku: 20.28 K
 - teplota tání vodíku: 14.01 K



James Dewar 1842 - 1923

Log T (K)

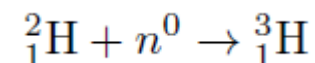


- kovový vodík: $p > 400 \text{ GPa}$
- uvnitř velkých plynných planet (Jupiter, Saturn, Uran, Neptun)

Izotopy vodíku

- **Deuterium (D)**

- ^2H , obsahuje 1 proton a 1 neutron
- relativní atomová hmotnost 2.013553212
- stabilní izotop
- zastoupení v přírodě 1.45×10^{-4}
- účinný moderátor neutronů (účinný průřez pro záchyt termálních neutronů jen 5.2×10^{-3} barn)



- **Tritium (T)**

- ^3H , obsahuje 1 proton a 2 neutrony
- relativní atomová hmotnost 3.016049
- nestabilní izotop ($T_{1/2} = 12.32$ y) $^3_1\text{H} \rightarrow ^3_2\text{He} + e^- + \bar{\nu}_e$
- zastoupení v přírodě 10^{-18}
- vysoký účinný průřez pro záchyt termálních neutronů 5330 barn

