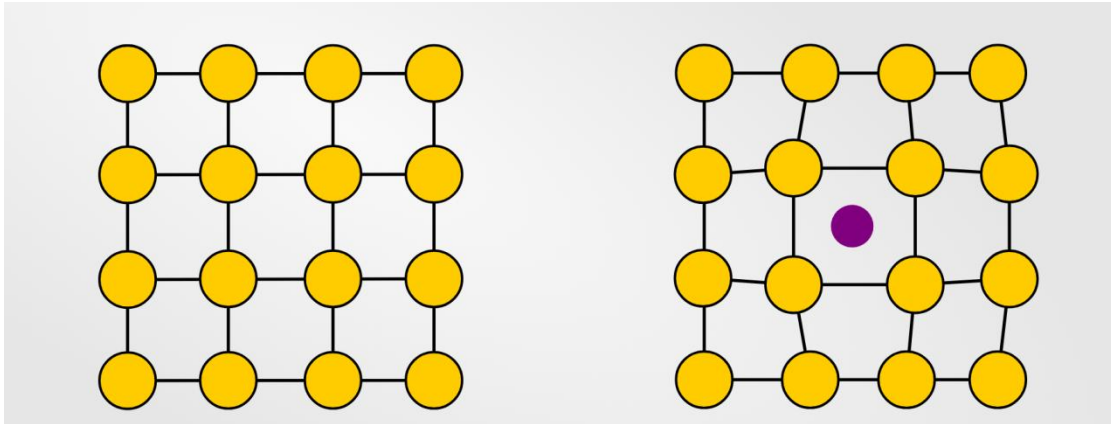


Absorpce vodíku v pevných látkách

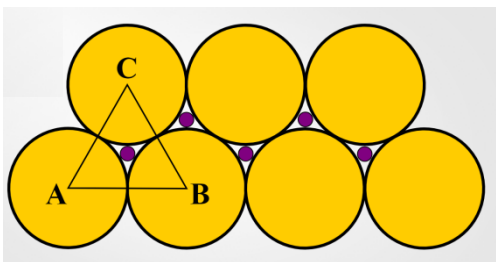
- vodík tvoří intersticiální tuhý roztok v pevných látkách



Intersticiální polohy v krystalické mřížce

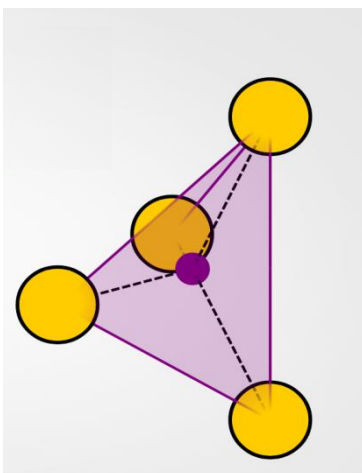
triangulární

NN = 3



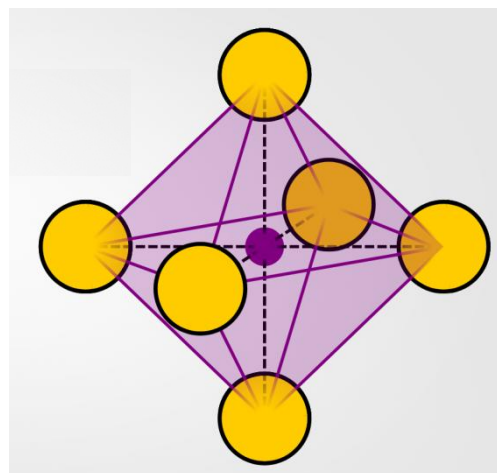
tetraedrální

NN = 4



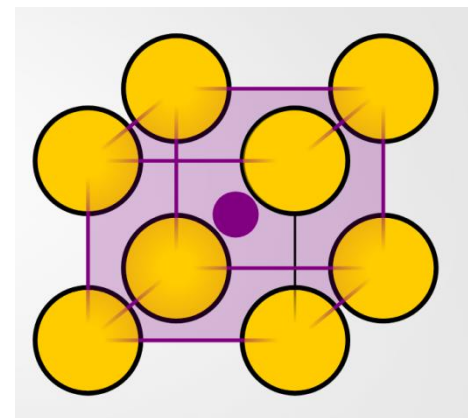
oktaedrální

NN = 8



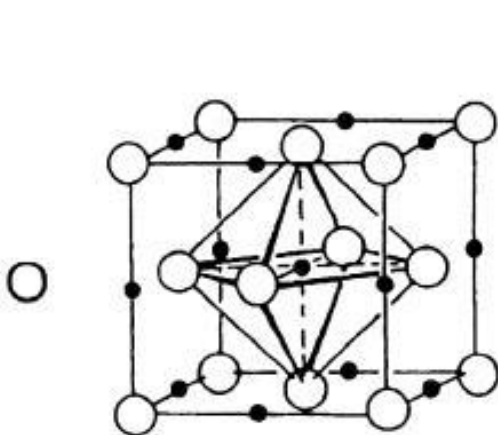
kubické

NN = 8

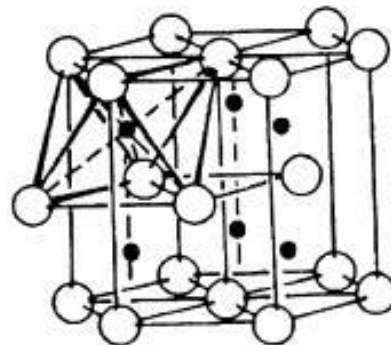


Intersticiální polohy v krystalické mřížce kovů

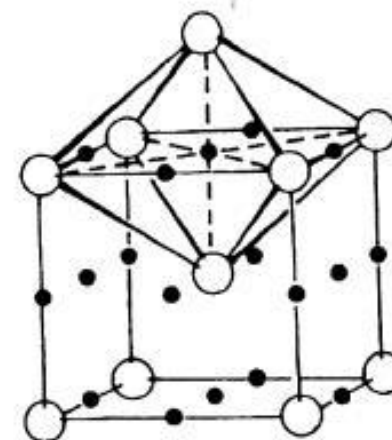
oktaedrální



4 O polohy na buňku
 $0.414r$

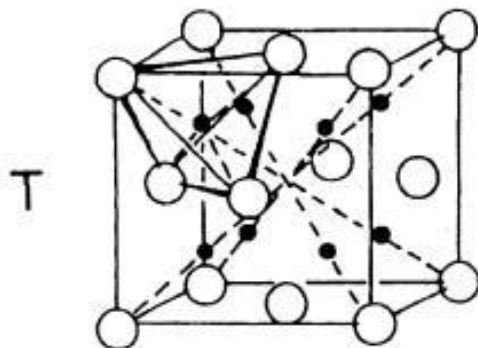


6 O poloh na buňku
 $0.414r$

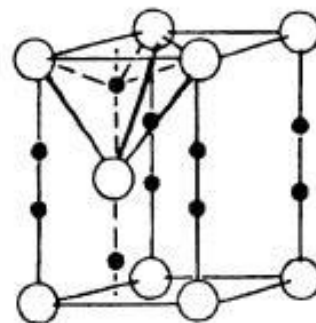


6 O poloh na buňku
 $0.155r$

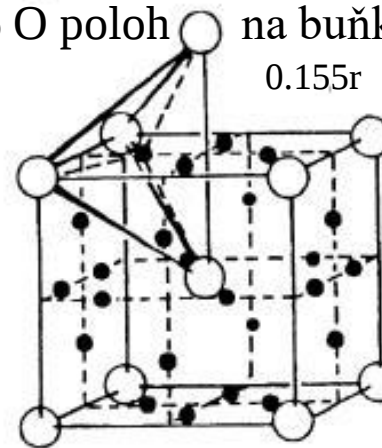
tetraedrální



fcc
8 T poloh na buňku
 $0.225r$



hcp
12 T polohy na buňku
 $0.225r$



bcc
12 T poloh na buňku
 $0.291r$

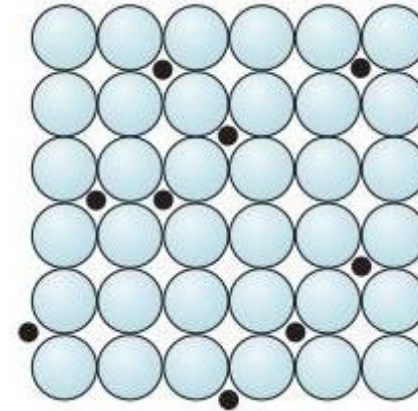
Absorpce vodíku v pevných látkách

- vodík tvoří intersticiální tuhý roztok v pevných látkách

- **Sievertův zákon** $c_H = \sqrt{K p_{H_2}}$

atomární koncentrace vodíku
absorbovaného v pevné látce

parciální tlak H_2 plynu
na povrchu pevné látky



- disociace molekul vodíku na povrch pevné látky: $H_2 \rightleftharpoons 2H$

- rovnovážná konstanta reakce disociace vodíku na povrchu: $K = \frac{[H][H]}{[H_2]} = \frac{c_H^2}{p_{H_2}}$

Absorpce vodíku v pevných látkách

- vodík tvoří intersticiální tuhý roztok v pevných látkách

- **Sievertův zákon** $c_H = \sqrt{K p_{H_2}}$

atomární koncentrace vodíku
absorbovaného v pevné látce

parciální tlak H_2 plynu
na povrchu pevné látky



Adolf Sieverts (1874-1947)
University of Göttingen

- disociace molekul vodíku na povrch pevné látky: $H_2 \rightleftharpoons 2H$

- rovnovážná konstanta reakce disociace vodíku na povrchu: $K = \frac{[H][H]}{[H_2]} = \frac{c_H^2}{p_{H_2}}$

Izoterma tlak – koncentrace (p-c)

- **p-c izotermy**

- **α fáze** - intersticiální tuhý roztok vodíku v matici kovu

- vodík obsazuje náhodně energeticky výhodný typ intersticiálních poloh v krystalické mřížce hostitelského materiálu

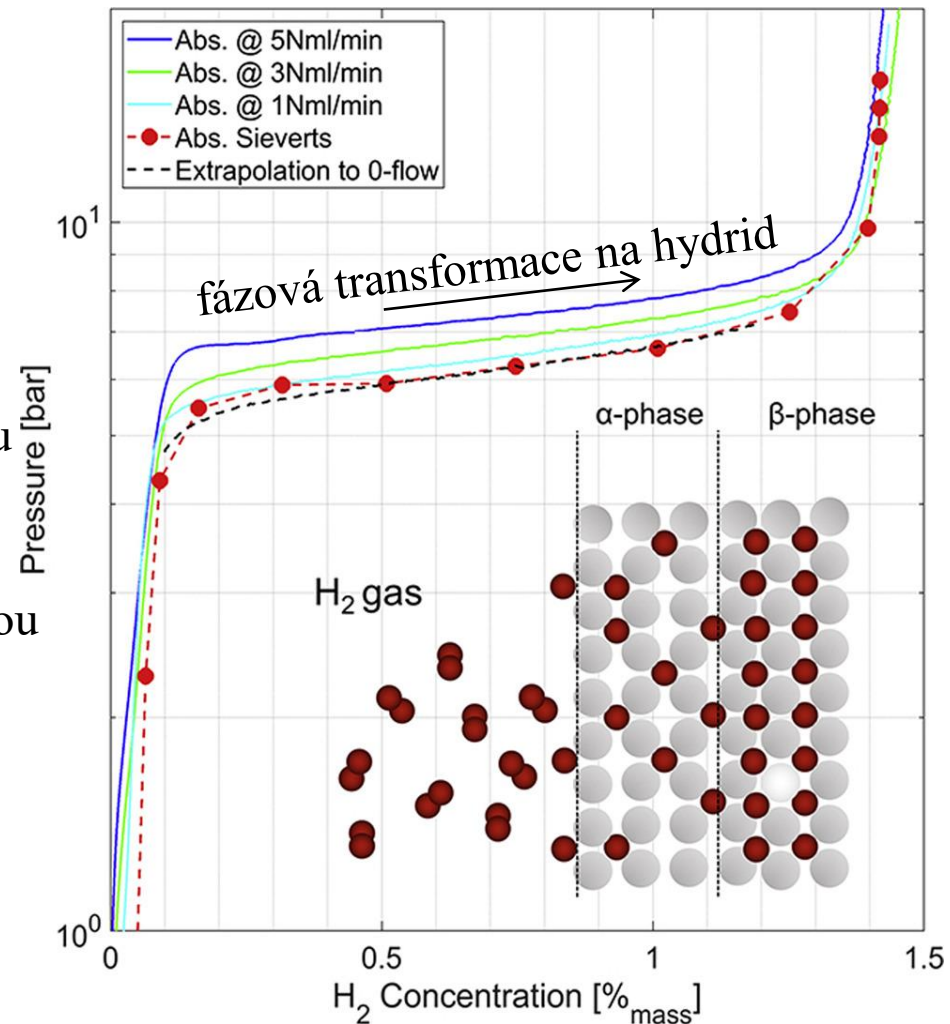
- **β fáze** - sloučenina kovu a vodíku (hydrid) s upořádáním na dlouhou vzdálenost

- H-H interakce začne být důležitá
- hydrid může mít jinou strukturu než původní materiál

- MH – monohydrid, $x_H = 1 \text{ M/H}$

- MH₂ – dihydrid, $x_H = 2 \text{ M/H}$

- MH₃ – trihydrid, $x_H = 3 \text{ M/H}$



Izoterma tlak – koncentrace (p-c)

- **p-c izotermy**

- mnoho kovů tvoří hydridy

prvky tvořící hydridy prvky netvořící hydridy

$M = A, B$

H																		He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne	
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar	
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
Fr	Ra	Ac	Unq	Unp	Unh	Uns	Uno	Une										

Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

- formační enthalpie hydridu



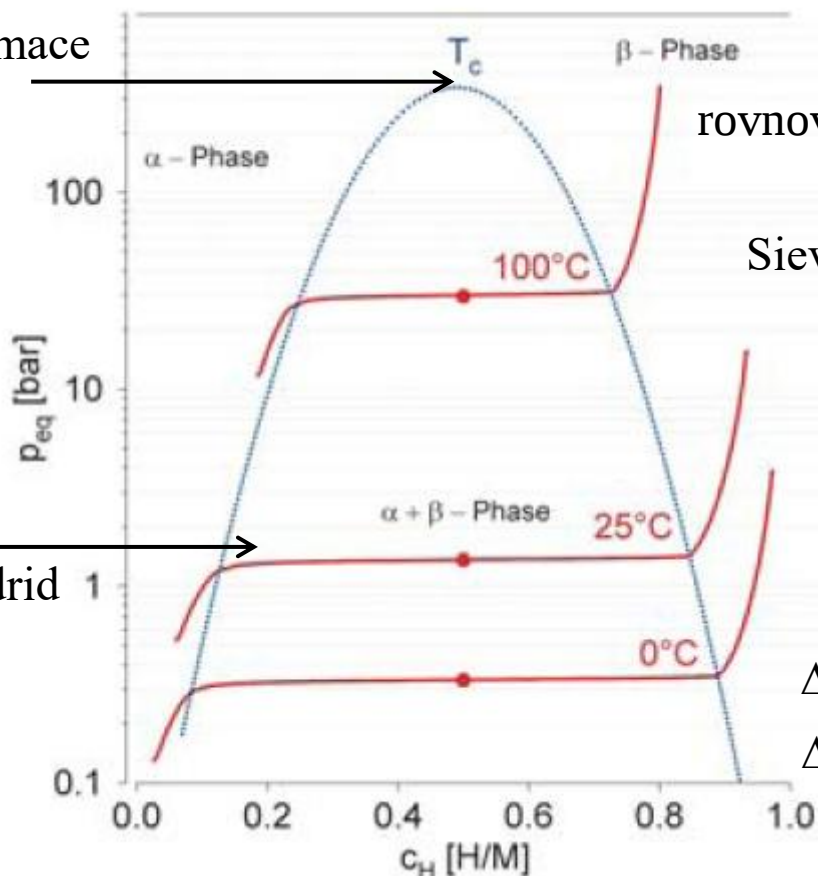
- Pd, Ni, Ru – katalyzátory pro disociaci H_2 molekul

Izoterma tlak – koncentrace (p-c)

• p-c izotermy

kritický bod
nad ním je transformace
 $\alpha \rightarrow \beta$ spojitá

rovnovážný tlak
fázové transformace na hydrid



rovnováha mezi β a α fází

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S = -RT \ln K_{eq}$$

rovnovážná konstanta reakce $\alpha \rightarrow \beta$

Sievertův zákon $K_{eq} = \frac{c_H^2}{p_{eq}}$

$$\ln(p_{eq}) = \frac{\Delta H}{RT} - \frac{\Delta S}{R}$$

ΔH - formační entalpie hydridu

ΔS - formační entropie hydridu

pro stabilní hydridy $\Delta H < 0$ a $\Delta S < 0$, reakce $\alpha \rightarrow \beta$ je exotermická, uvolněné teplo $\Delta Q = T \Delta S$

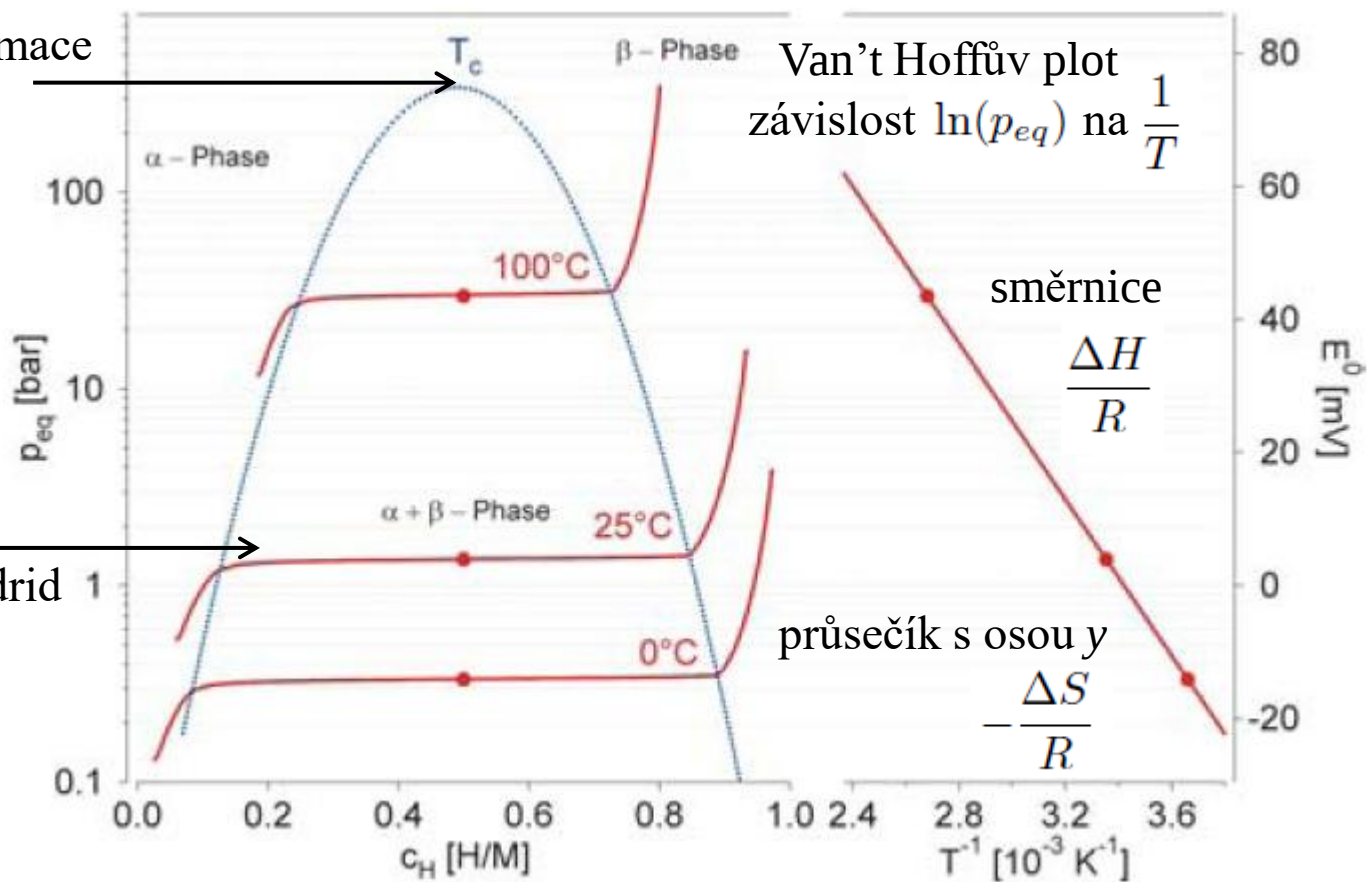
Van't Hoffův plot

• Van't Hoffův plot

$$\ln(p_{eq}) = \frac{\Delta H}{RT} - \frac{\Delta S}{R}$$

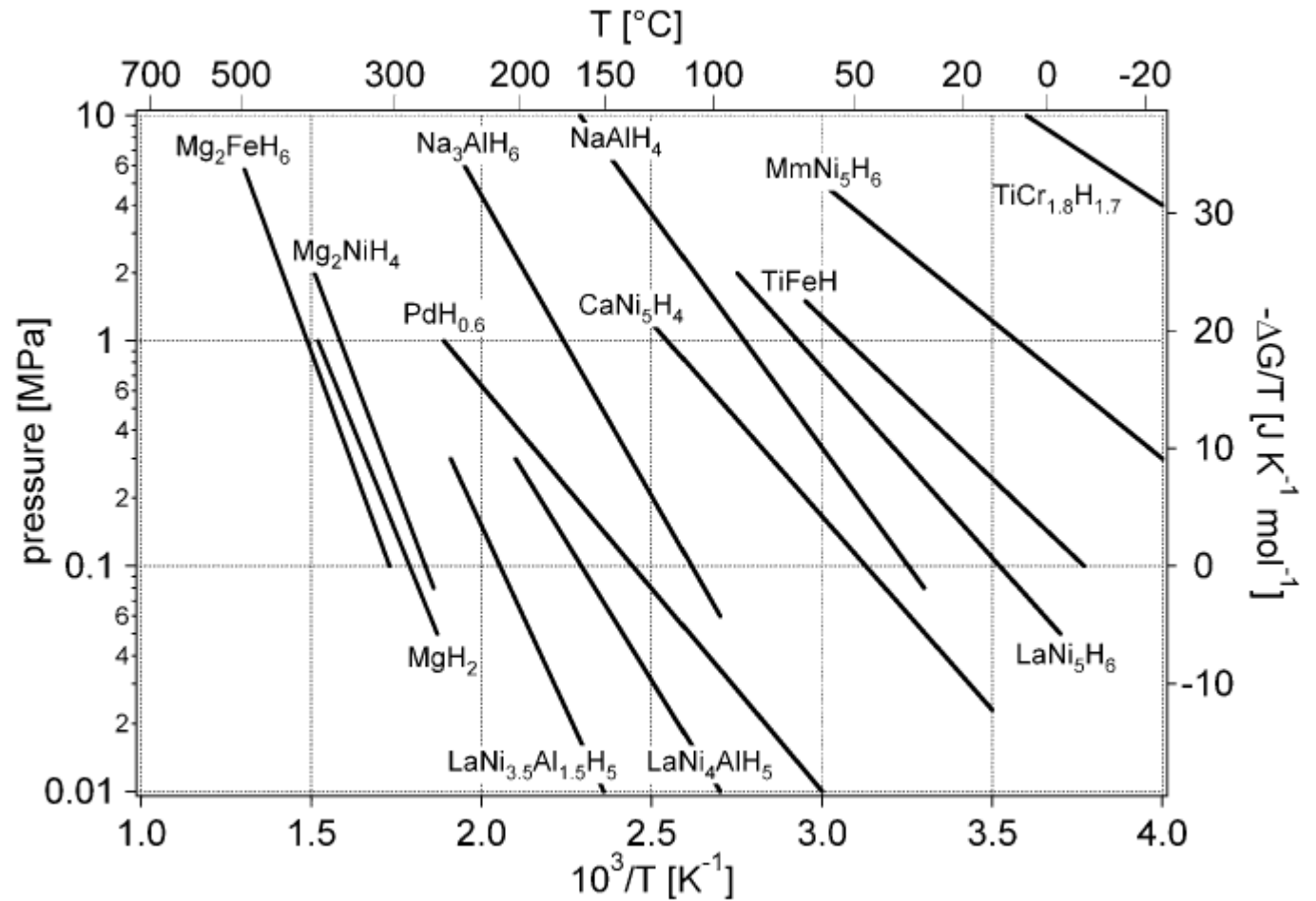
kritický bod
nad ním je transformace
 $\alpha \rightarrow \beta$ spojitá

rovnovážný tlak
fázové transformace na hydrid



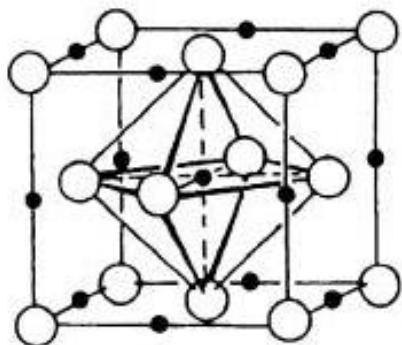
Van't Hoff plot

- Van't Hoff plot

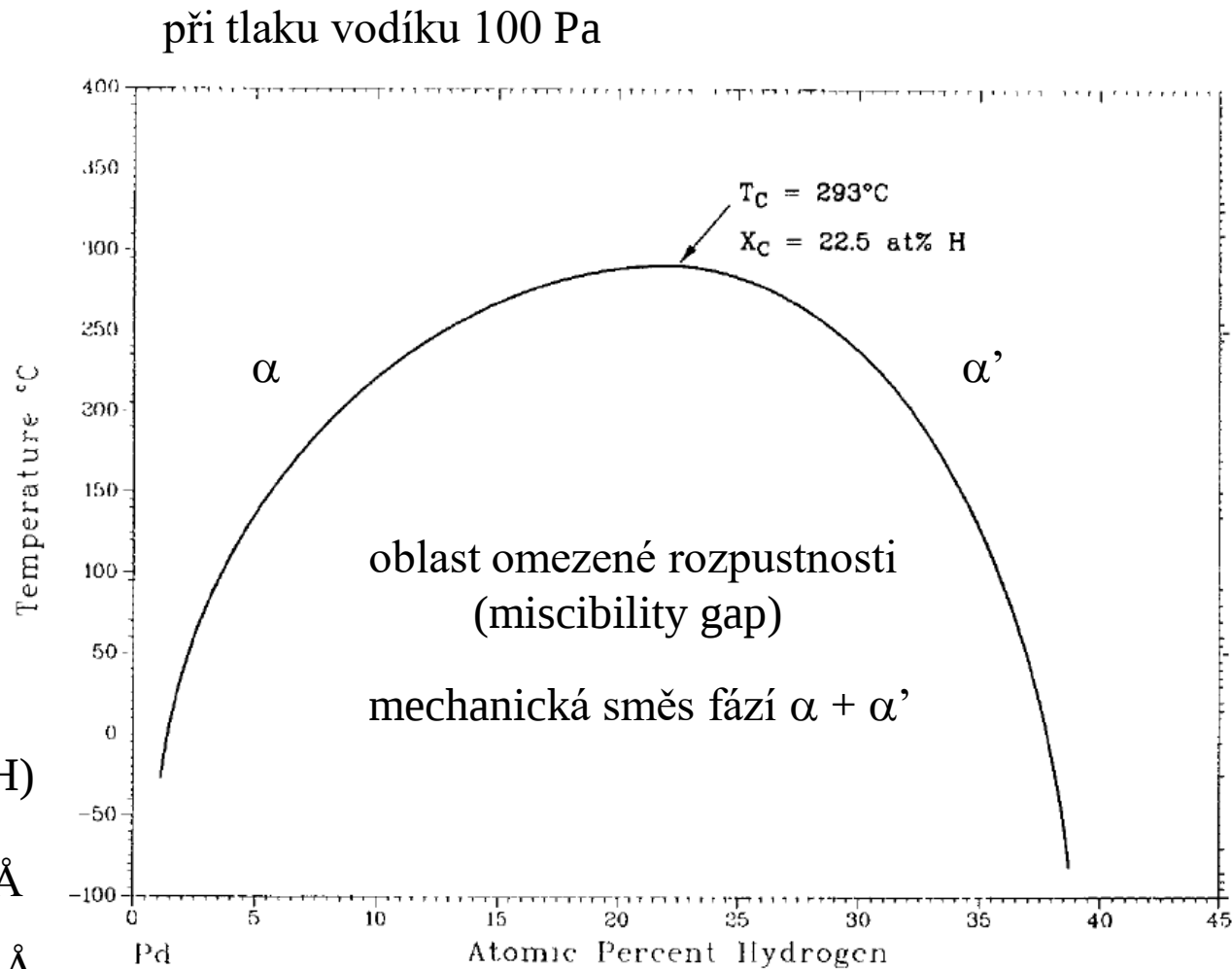


Fázový diagram Pd-H

- Pd –H systém
- Pd fcc struktura
- vodík obsazuje O polohy

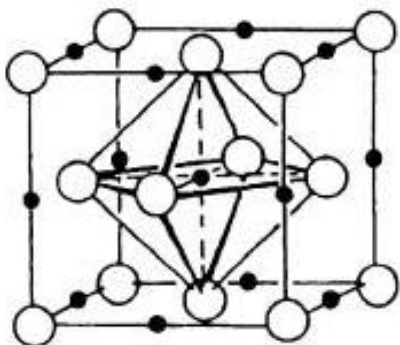


- jsou 4 na fcc buňku,
tj. max koncentrace vodíku
 $x_H = 1 \text{ H/Pd}$ (monohydrid PdH)
- α fáze fcc ($Fm3m$) $a = 3.895 \text{ \AA}$
- α' fáze fcc ($Fm3m$) $a = 4.025 \text{ \AA}$

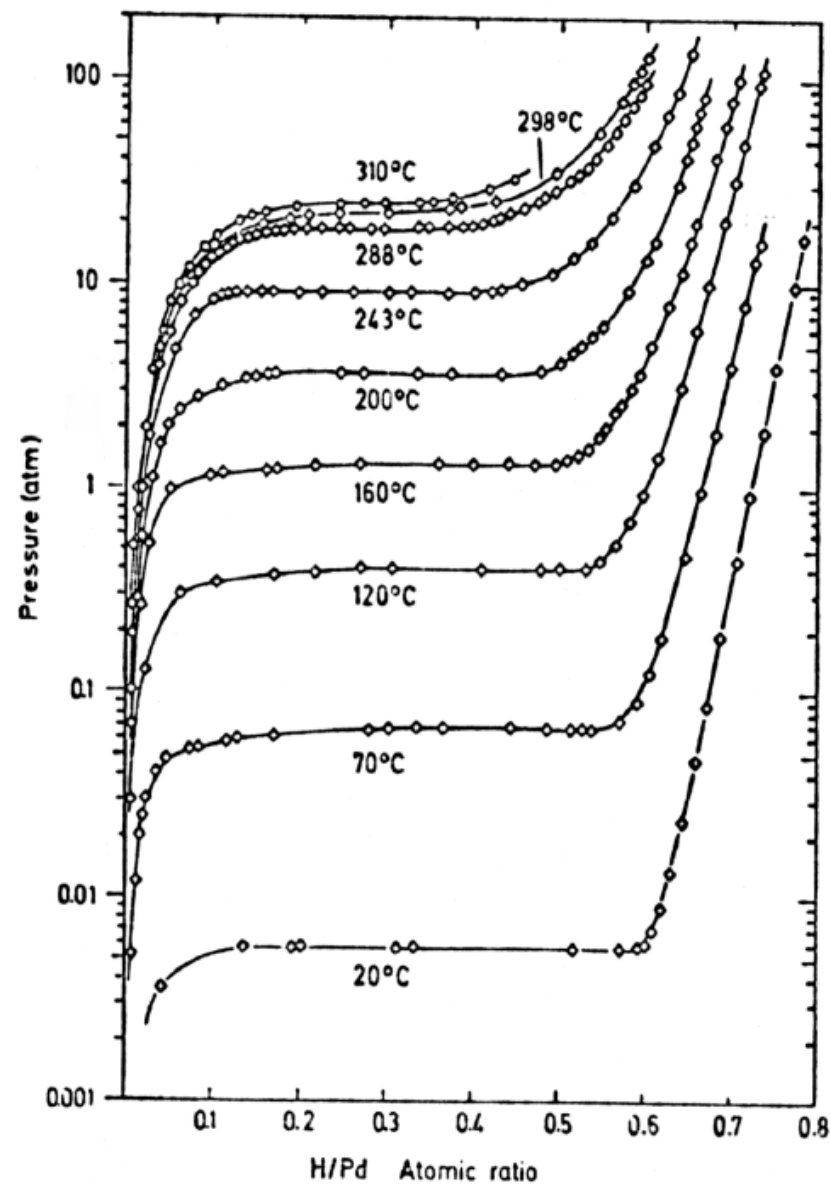


Fázový diagram Pd-H

- Pd –H systém
- Pd fcc struktura
- vodík obsazuje O polohy



- jsou 4 na fcc buňku,
tj. max koncentrace vodíku
 $x_H = 1$ H/Pd (monohydrid PdH)
- α fáze fcc ($Fm3m$) $a = 3.895\text{\AA}$
- α' fáze fcc ($Fm3m$) $a = 4.025\text{\AA}$



Fázový diagram Pd-H

Pd-H systém

