

High-entropy alloys: nové materiály pro vodíkové aplikace

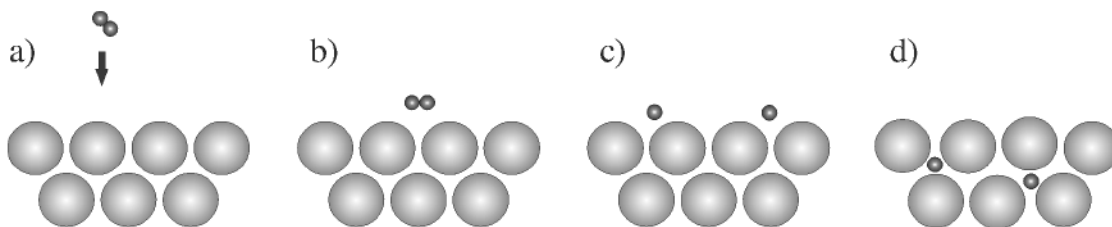
(Silvie Černá, Katedra fyziky kondenzovaných látek, silvie.cerna@matfyz.cuni.cz)

Velká poptávka po alternativních zdrojích energie poutá naši pozornost na materiály vhodné pro skladování vodíku. Vodík je alternativním palivem budoucnosti, protože jeho využití pro energetické účely neznečišťuje životní prostředí. Nová generace systémů s vysokou entropií (HEA = high-entropy alloys), obsahujících vzácné zeminy, je považována za potenciálně vhodnou ke skladování vodíku.

Projekt se zaměří na nalezení nových vzácnozeminných slitin s velkou entropií (HEA) vhodných ke skladování vodíku, jejich přípravu a studium jejich vlastností.

Některé druhy kovových materiálů dokážou pohltit velké množství vodíku a při zahřátí jej opět uvolnit. Vodíkem nasycené materiály, tzv. hydridy, jsou charakterizovány expanzí krystalové mřížky a často dramaticky odlišnými magnetickými a dalšími elektronovými vlastnostmi. Tyto hydridy se obvykle vyrábějí syntézami kovů s plynným vodíkem za vysokých teplot a tlaků.

Typická absorpce vodíku probíhá v několika krocích. Molekula vodíku, která se nachází v blízkosti absorbujícího materiálu (Obr. 1a), interaguje s materiálem prostřednictvím Van der Waalsových sil (Obr. 1b). Na povrchu se vodíková molekula rozštěpí (Obr. 1c) a do intersticiálních poloh kovového materiálu se vodík absorbuje v podstatě jako proton (Obr. 1d). Elektron se zapojuje do kovové vazby. To je právě jednou z výhod hydridů, které se pro tuto vlastnost hojně využívají k uskladnění vodíku (vodík jako atom se skládá z protonu, elektronu a „spousty volného místa“). Jedním ze zářných příkladů je sloučenina LaNi_5 . Hustota uskladněného vodíku zde může dosáhnout až 150 kg/m^3 , což je asi dvakrát více než u vodíku kapalného a dvacetkrát více než u běžných tlakových lahví. To vše bez nebezpečí exploze, odpařování a podobně. Schopnost absorbovat vodík až do fáze $\text{LaNi}_5\text{H}_{6.7}$ činí tuto sloučeninu výtečným médiem pro jeho skladování. K jeho úplnému uvolnění stačí zahřát hydrid na méně než 300°C .



Obr. 1: Schéma absorpce vodíku: a) pevná látka ve vodíkovém prostředí, b) interakce vodíkové molekuly prostřednictvím Van der Waalsových sil, c) disociace vodíkové molekuly, d) absorpce do intersticiálních poloh a difuze.

Předmětem práce na projektu bude zkoumat vznik vzácnozeminných HEA fází a jejich schopnost absorbovat vodík v závislosti na složení.