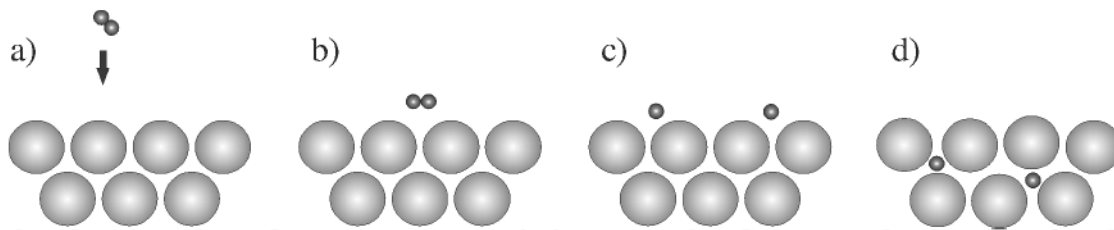


## Studium absorpce vodíku v uranových sloučeninách

(Silvie Černá, KFKL, [maskova@mag.mff.cuni.cz](mailto:maskova@mag.mff.cuni.cz))

Vodík je považován za palivo budoucnosti. Do popředí se proto také dostává problém interakce vodíku s pevnými látkami. Některé druhy kovových sloučenin dokážou pohltit velké množství vodíku a při zahřátí jej opět uvolnit. Vodíkem nasycené sloučeniny, tzv. hydridy, jsou charakterizovány expanzí krystalové mříže 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  $\text{LaNi}_5$ . Hustota uskladněného vodíku zde může dosáhnout až  $150 \text{ kg/m}^3$ , 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  $300 \text{ }^\circ\text{C}$ .



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.

Absorpce vodíku je mocným nástrojem schopným měnit nejen krystalovou, ale elektronovou strukturu intermetalických sloučenin. Výsledkem je, že nové sloučeniny (hydridy) vykazují kvalitativně nové fyzikální vlastnosti a takové modifikace nám poskytují další informace o zvláštích interakcí mezi atomy ve výchozích sloučeninách. V úvahu je třeba vzít dva hlavní účinky absorpce vodíku na intermetalické sloučeniny. Vodík hraje roli „záporného tlaku“ (působí jako malá porucha v systému, která expanduje krystalovou mříž). Dalším někdy důležitějším efektem je vazba vodíku na další atomy v mřížce.

Na absorpci vodíku jsou zvláště citlivé intermetalické sloučeniny 5f-prvků, včetně uranu. Meziatomová vzdálenost mezi atomy uranu je zásadním parametrem, který určuje magnetické vlastnosti. Expanze krystalové mříže má tedy za následek změny v magnetických vlastnostech studovaných sloučenin.

Práce se zaměří na studium vlivu absorpce vodíku na krystalovou strukturu a magnetické vlastnosti vybraných uranových sloučenin.