



Jürgen Gottwald (Autor)

Kernspinresonanzuntersuchungen zur Diffusion von Wasserstoff in den Di- und Trihydriden der Übergangsmetalle

Jürgen Gottwald

Kernspinresonanzuntersuchungen zur Diffusion von
Wasserstoff in den Di- und Trihydriden
der Übergangsmetalle



Cuvillier Verlag Göttingen

<https://cuvillier.de/de/shop/publications/3600>

Copyright:

Cuvillier Verlag, Inhaberin Annette Jentzsch-Cuvillier, Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen,
Germany

Telefon: +49 (0)551 54724-0, E-Mail: info@cuvillier.de, Website: <https://cuvillier.de>

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis	5
Abbildungsverzeichnis	9
Tabellenverzeichnis	11
1 Einleitung	13
2 Grundlagen.....	15
2.1 Theorie der Diffusion leichter Teilchen	15
2.2 Makroskopische Größen	16
2.3 Diffusion in kubischen Gittern	17
3 Mikrostruktur.....	19
3.1 Seltenerdmetalle und Yttrium	19
3.2 Mikrostruktur	22
3.2.1 α -Phase („Solid Solution“)	22
3.2.2 β -Phase.....	23
3.2.3 γ -Phase	23
3.2.4 δ - und ε -Phase.....	23
3.3 Strukturbildung, Metall-Halbleiter-Übergang.....	24
3.3.1 Ordnung in der α -Phase.....	24
3.3.2 Ordnung in der β -Phase.....	25
3.4 Yttrium	27
3.5 Hafnium	28
3.5.1 α -Phase	29
3.5.2 δ -Phase.....	29
3.5.3 δ - δ' -Phasenübergang	30
3.5.4 ε -Phase	30
3.6 Strukturuntersuchungen an Hafniumdihydriden	32
3.7 Literaturdaten Hafnium.....	38
4 Probenherstellung.....	39
4.1 Yttrium und Lanthan.....	39
4.1.1 Yttrium.....	39
4.1.2 Lanthan	40
4.2 Hafnium	40

Inhaltsverzeichnis

5	Diffusionsuntersuchungen mittels NMR	41
5.1	Spin-Gitter-Relaxation	41
5.1.1	Elektronische Relaxation.....	42
5.1.2	Dipolare Relaxation	42
5.1.2.1	Das 2. Moment.....	43
5.1.2.2	BPP.....	45
5.1.2.3	Gitterspezifische Modelle	47
5.1.3	Quadrupolare Relaxation	48
5.1.4	Relaxation an paramagnetischen Ionen	50
5.1.5	Anomale Relaxation.....	51
5.2	Spin-Spin-Relaxation	51
5.3	PFG	52
6	Experimentelles	55
6.1	T_1 -Pulsfolgen.....	55
6.2	T_2 -Pulsfolgen.....	57
6.3	PFG	58
6.4	Berechnung des Doppelintegrals	61
6.5	PFG-Pulsfolgen	61
6.5.1	Die Pulsfolge nach Stejskal und Tanner.....	61
6.5.2	Die Pulsfolge nach Tanner.....	63
6.5.3	Die Pulsfolge nach Karlicek und Lowe.....	64
6.6	Hintergrundgradient	65
6.7	Einfluß des internen Hintergrundgradienten.....	66
7	Experimenteller Aufbau	71
7.1	Signalerzeugung	72
7.2	Detektion	73
7.3	Erzeugung der Gradienten.....	73
7.4	Die Gradientenspule	75
7.5	Die Abschirmspule	76
7.6	Probenköpfe.....	79
7.6.1	PFG (Hochtemperatur)	79
7.6.2	T_1 -Spektrometer (Hochtemperatur).....	79
7.7	Temperaturregelung	82
8	Meßergebnisse und Diskussion	83

Inhaltsverzeichnis

8.1	Wasserstoff in Hafnium	83
8.1.1	PFG-Ergebnisse.....	83
8.1.2	Spin-Gitter-Relaxationsmessungen	84
8.1.2.1	Wasserstoff-Wirts-Wechselwirkung.....	84
8.1.2.2	Konzentrationsabhängigkeit der Spin-Gitter-Relaxation	85
8.1.2.3	Relaxationsdaten für $x = 1,71$	87
8.1.2.4	Relaxationsdaten für $x = 1,81$	88
8.1.2.5	Relaxationsdaten für $x = 1,90$ und $1,94$	89
8.1.3	Sprungweiten	93
8.2	Vergleich der HfH_x -Messungen mit Literaturdaten.....	96
8.3	Deuterium in Hafnium.....	98
8.4	Wasserstoff in Yttrium	105
8.4.1	Diffusionsdaten	105
8.4.2	Spin-Gitter-Relaxationsmessungen	107
8.5	Vergleich der YH_x -Messungen mit Diffusionsdaten anderer Dihydride.....	110
8.6	Lanthantrihydrid.....	112
9	Zusammenfassung	121
10	Summary	123
	Symbole und Abkürzungen	131
	Literatur	135