

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis

Symbolverzeichnis

Abbildungsverzeichnis

Tabellenverzeichnis

1 Einleitung	1
2 Grundlagen	5
2.1 Struktur von Metallhydriden am Beispiel der Lavesphasen	5
2.2 Wasserstoffdiffusion in Metallhydriden	11
2.2.1 Mikroskopische Betrachtung der Diffusion leichter Teilchen	11
2.2.2 Makroskopische Betrachtung der Diffusion leichter Teilchen	14
2.2.3 Gitterstruktur und Tracer-Diffusionskoeffizient D_T	14
2.3 Prinzipien der Magnetischen Resonanz	18
2.3.1 Spin und Magnetfeld	18
2.3.2 Spin-Gitter-Relaxation	19
2.3.3 Modelle für Korrelationsfunktionen am Beispiel der dipolaren Relaxation	21
2.3.4 Spin-Spin-Relaxationsrate	26
2.4 Puls-NMR-Experimente zur Relaxationszeitbestimmung	27
2.5 Spin-Echo-Experimente mit gepulsten Magnetfeldgradienten	29
2.5.1 Grundlagen der PFG-NMR am Beispiel der PFG-Hahn-Sequenz	29
2.5.2 PFG-SE-Sequenz	32
2.5.3 APFG-Sequenz	33
2.5.4 Anwendungsgebiete der vorgestellten Pulsfolgen	35

3 Experimenteller Aufbau	37
3.1 NMR-Spektrometer	37
3.1.1 Allgemeines	37
3.1.2 PFG-NMR-Spektrometer	38
3.1.3 T_1 -NMR-Spektrometer	46
3.2 Neuer PFG-NMR-Tiefemperatur-Probenkopf	47
3.2.1 Unterschiedliche Konzepte für Tieftemperaturmessungen	47
3.2.2 Schematischer Aufbau des neuen Probenkopfs und Testmessungen	49
3.3 Wasserstoff-Belade-Apparatur	55
3.4 Thermische Desorptionsspektroskopie	59
3.5 Röntgendiffraktometrie	62
4 Ergebnisse und Diskussion für C15-HfTi₂H_x	65
4.1 Probenpräparation	65
4.1.1 Hafnium-Titan-Wasserstoff-Verbindungen	65
4.1.2 Probenherstellung	67
4.2 Probencharakterisierung	68
4.2.1 Röntgendiffraktometrische Untersuchungen an C15-HfTi ₂ H _x	69
4.2.2 Neutronendiffraktometrie-Untersuchungen an C15-HfTi ₂ D _{4,0}	73
4.3 Untersuchung der Diffusionsmechanismen in C15-HfTi₂H_x	76
4.3.1 Vergleich der Methoden zur Untersuchung der Bewegungsprozesse	76
4.3.2 QENS-Untersuchungen an C15-HfTi ₂ H _x	77
4.3.3 Lokaler und weit reichender Bewegungsprozess	79
4.3.4 PFG-NMR-Untersuchungen – Weit reichender Bewegungsprozess	82
4.3.5 T_1 -NMR-Untersuchungen – Weit reichender Bewegungsprozess	88
4.3.6 T_1 -NMR-Untersuchungen – Lokaler Bewegungsprozess	93
4.3.7 Eigenschaften ähnlicher Verbindungen	101
5 Ergebnisse und Diskussion für C15-ZrV₂D_x	103
5.1 Probenpräparation	103
5.1.1 Zirkon-Vanadium-Wasserstoff-Verbindungen	103
5.1.2 Herstellung der intermetallischen Verbindung	104
5.1.3 Probenbeladung	104

5.2 Probencharakterisierung	105
5.2.1 Thermische Desorptionsspektroskopie	105
5.2.2 Röntgendiffraktometrie	107
5.2.3 Phasendiagramm	110
5.3 NMR-Untersuchungen an ZrV_2D_x	111
5.3.1 T_1 -NMR-Untersuchungen und Phasenübergänge	111
5.3.2 T_1 -NMR-Diffusionsuntersuchungen	113
5.3.3 PFG-NMR-Untersuchungen	117
6 Zusammenfassung	121
7 Summary	125
Literaturverzeichnis	131