

# Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Problemstellung und Literaturübersicht	3
3	Versuchsaufbau und Meßmethode	9
3.1	Apparatur	9
3.2	Versuchsdurchführung	10
3.2.1	Probenvorbereitung und Aktivierung	13
3.2.2	Kontamination der Probe durch Gasgemische	14
3.2.3	Kontamination der Probe durch Vorbelegung	14
3.3	Probenmaterial	16
3.3.1	LaNi <sub>5</sub> -Pulver	16
3.3.2	LaNi <sub>4,7</sub> Al <sub>0,3</sub> -Pulver	17
3.4	Fehlerbetrachtung	17
4	Versuchsergebnisse	23
4.1	LaNi <sub>5</sub> und LaNi <sub>4,7</sub> Al <sub>0,3</sub> , nicht kontaminiert	23
4.2	Sauerstoff auf LaNi <sub>5</sub> und LaNi <sub>4,7</sub> Al <sub>0,3</sub>	25
4.3	Wasserdampf auf LaNi <sub>5</sub>	29
4.4	Kohlenmonoxid auf LaNi <sub>5</sub>	31
4.5	Schwefelwasserstoff auf LaNi <sub>5</sub>	35
4.6	Kohlendioxid auf LaNi <sub>5</sub>	37
4.7	Stickstoff auf LaNi <sub>5</sub>	40
5	Modellbetrachtungen zur Wasserstoffaufnahme	41
5.1	Anforderungen an das Metallhydrid-System	41
5.2	Formulierung eines allgemeingültigen Modells	44
5.2.1	Physisorption	48

5.2.2 Chemisorption und Oberflächendurchtritt	49
5.2.3 Diffusion	50
5.2.4 Phasenumwandlung	52
5.2.5 Numerische Lösungsprozedur	52
5.3 Grenzfallbetrachtungen	54
5.3.1 Dissoziationskontrolle	54
5.3.2 Durchtrittskontrolle	55
5.3.3 Diffusionskontrolle	56
6 Ergebnisse der Modellrechnungen	58
6.1 Charakteristische Ergebnisse der Grenzfallbetrachtungen	58
6.2 Typische Ergebnisse der Modellrechnungen unter konsequenter Berücksichtigung aller Teilreaktionen	60
6.2.1 Beschreibung des Übergangsverhaltens anhand der Teilströme	62
6.3 Einfluß verschiedener Parameter auf den Übergang von Diffusionskontrolle zu Oberflächenkontrolle	68
6.3.1 Diffusionskonstante, Partikelradius und Aktivierungsenergien	68
6.3.2 Fremdgasbelegung	70
6.3.3 Bindungsenthalpien	70
6.3.4 Wasserstoffgasdruck	75
6.3.5 Temperatur	79
7 Diskussion	84
7.1 Modellbetrachtungen	84
7.2 Wasserstoffaufnahme von nichtkontaminiertem $\text{LaNi}_5$ und $\text{LaNi}_{4,7}\text{Al}_{0,3}$	88
7.3 Kontamination	91
8 Zusammenfassung	99
Verzeichnis der verwendeten Symbole	103
Literaturverzeichnis	105