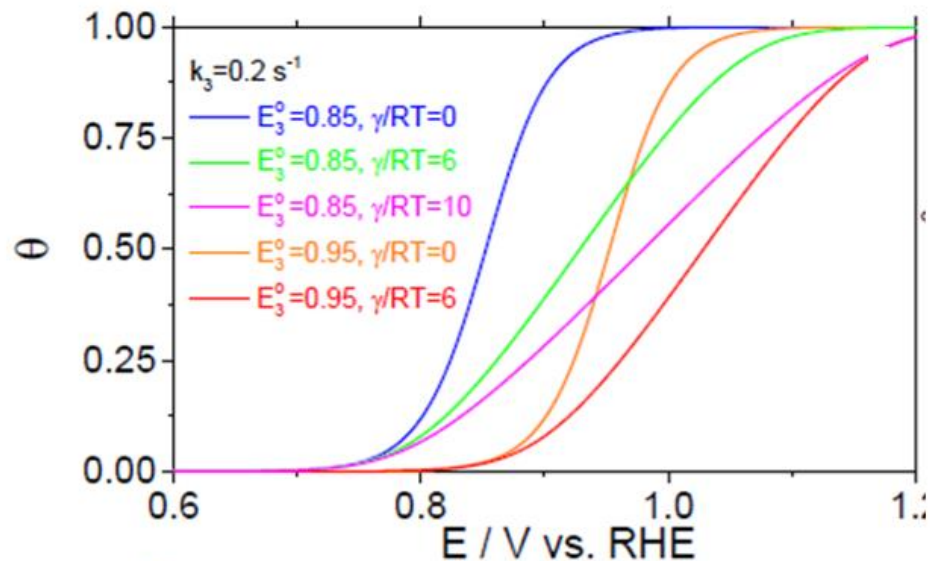
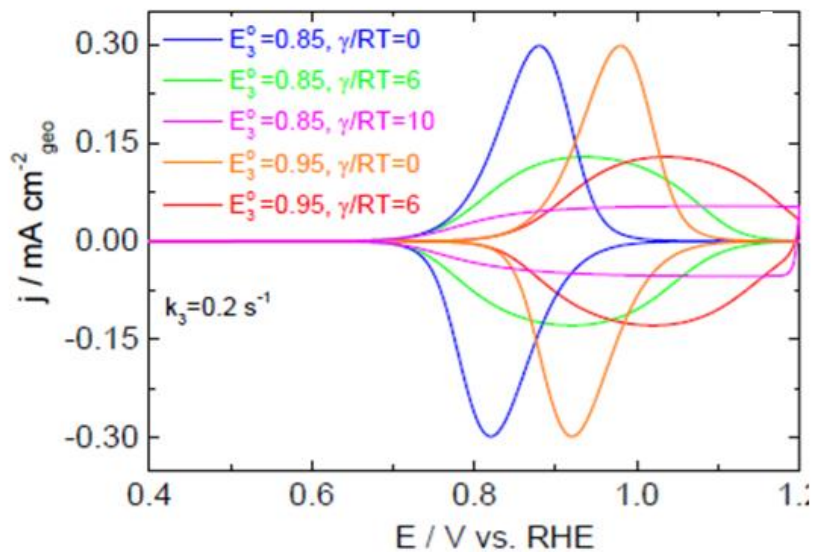
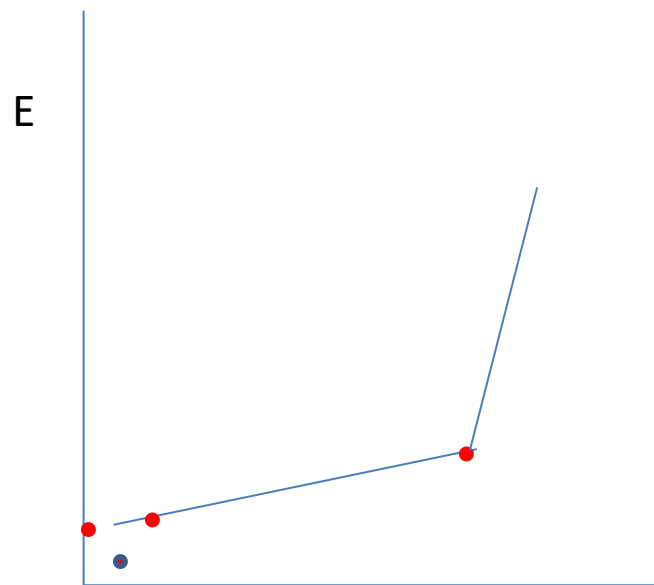


Пик «размывается» при усилении отталкивания, сужается при усилении притяжения.

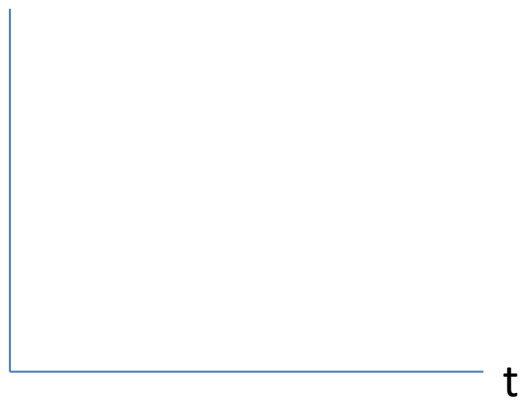
Пик смещается, что бывает и по кинетическим причинам.



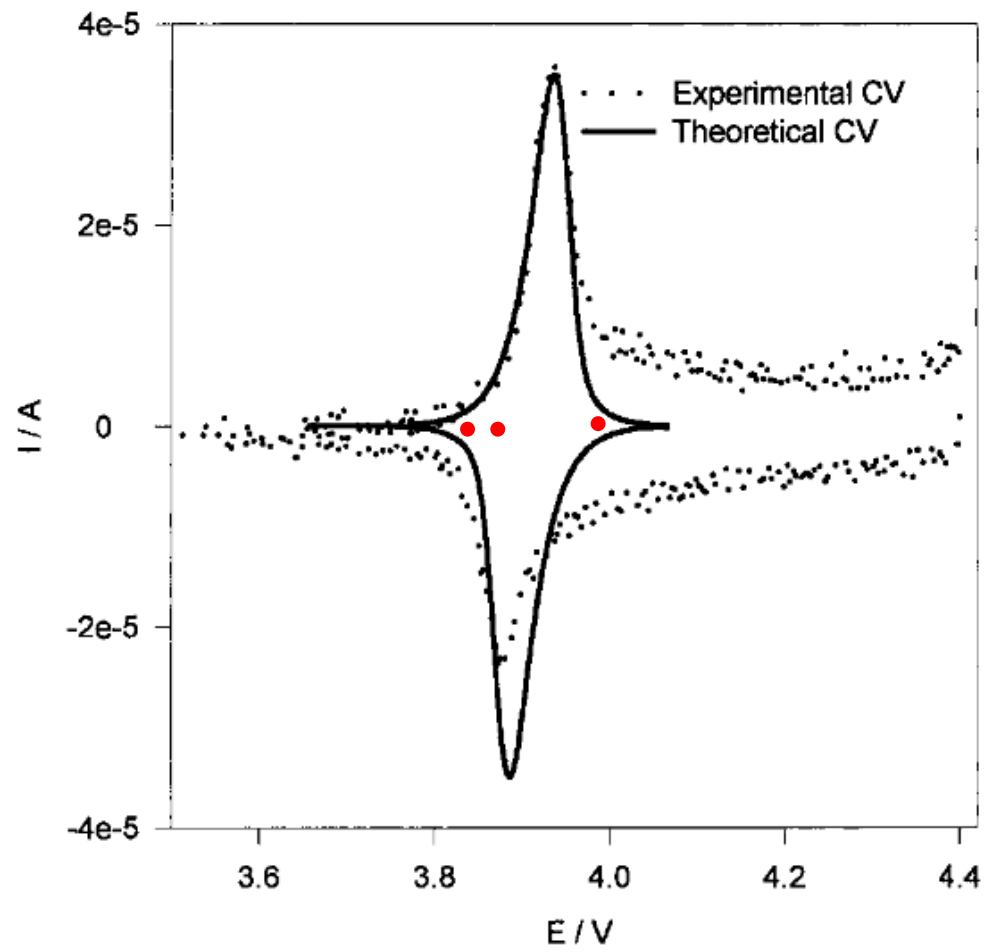
I=const

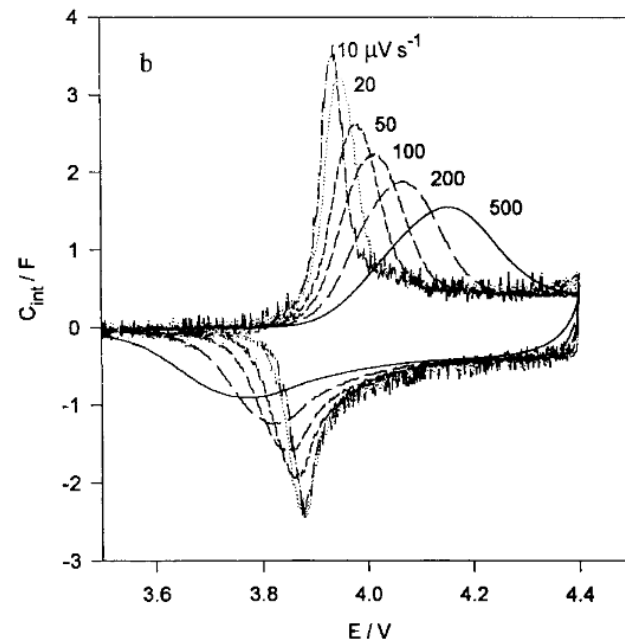
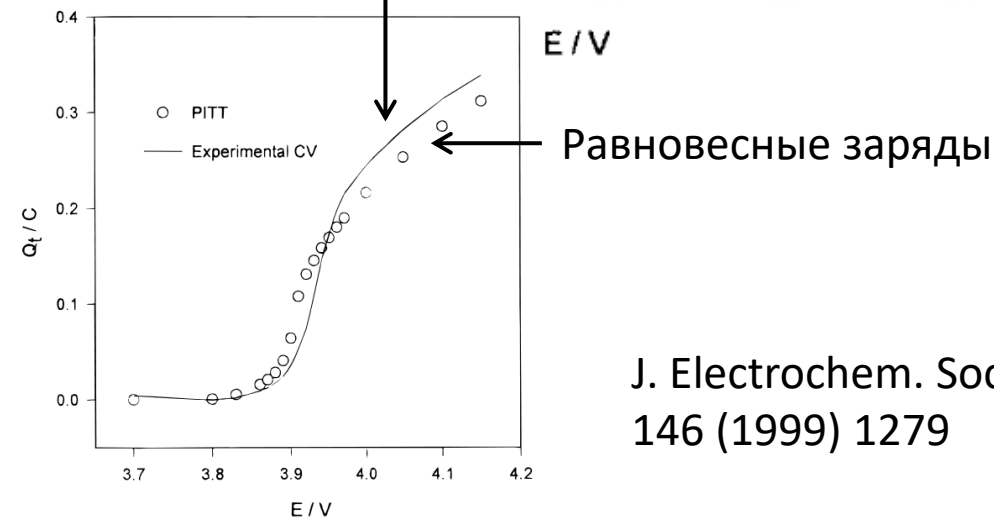
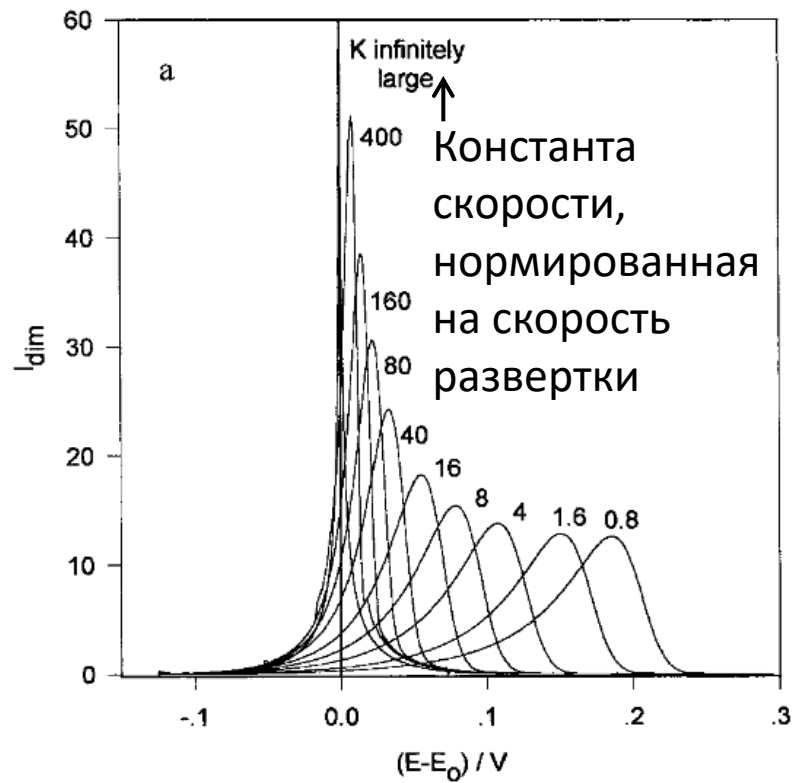
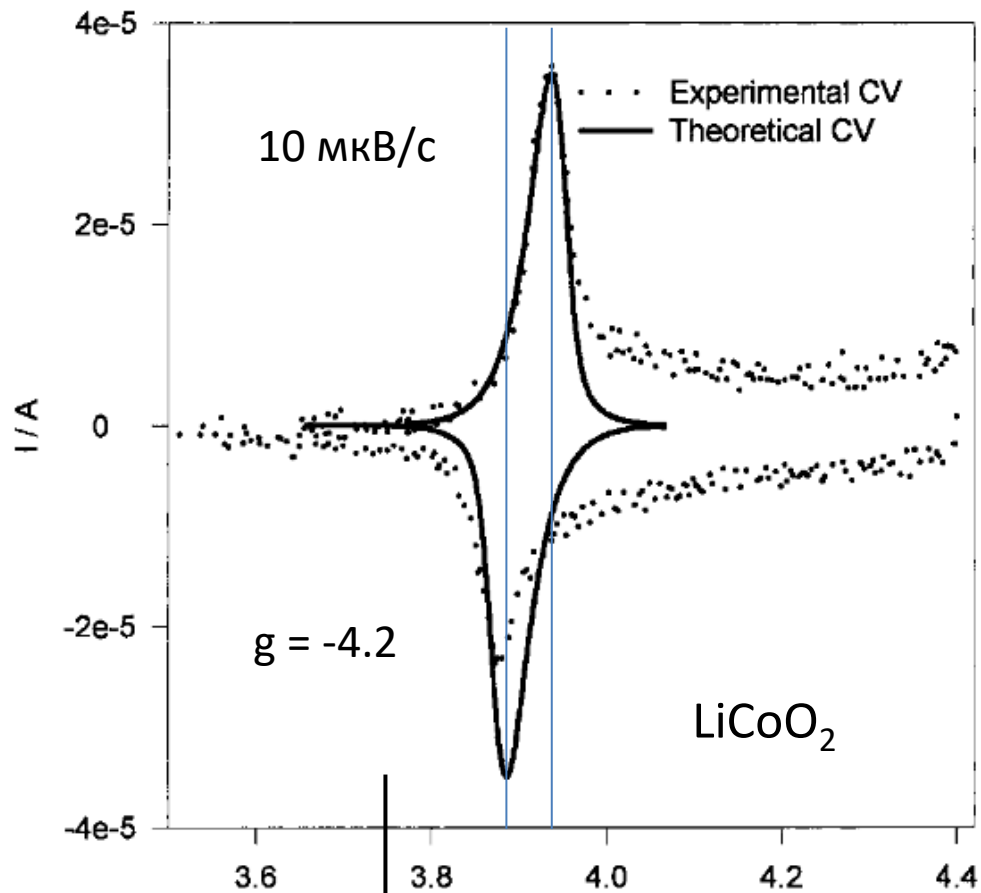


E=const

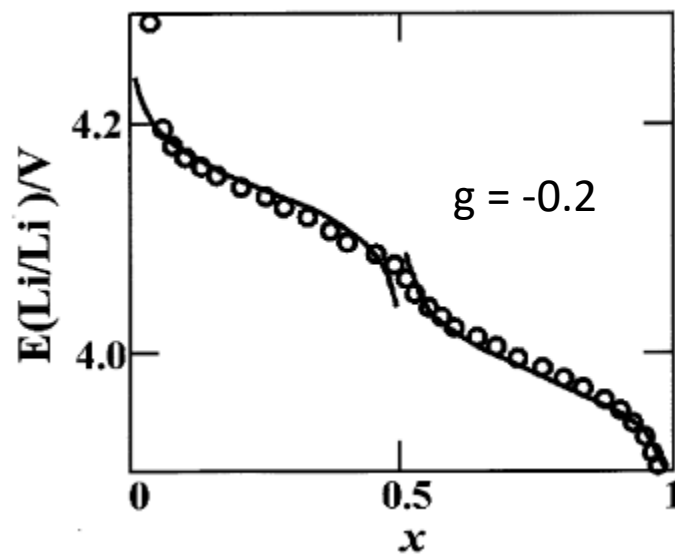
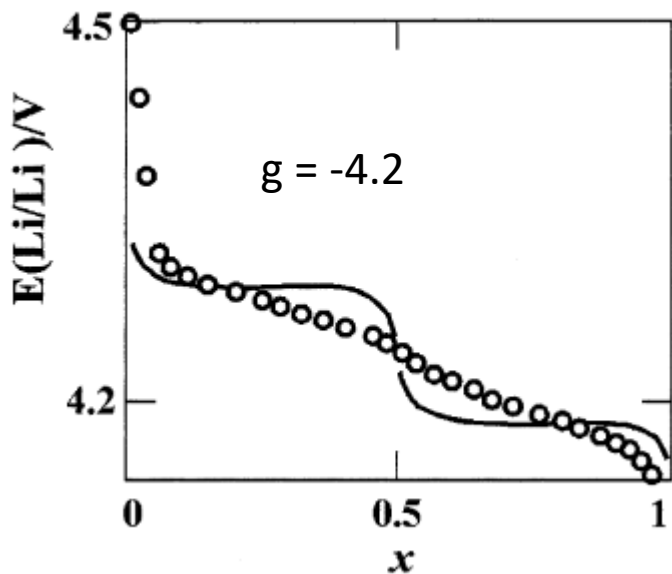
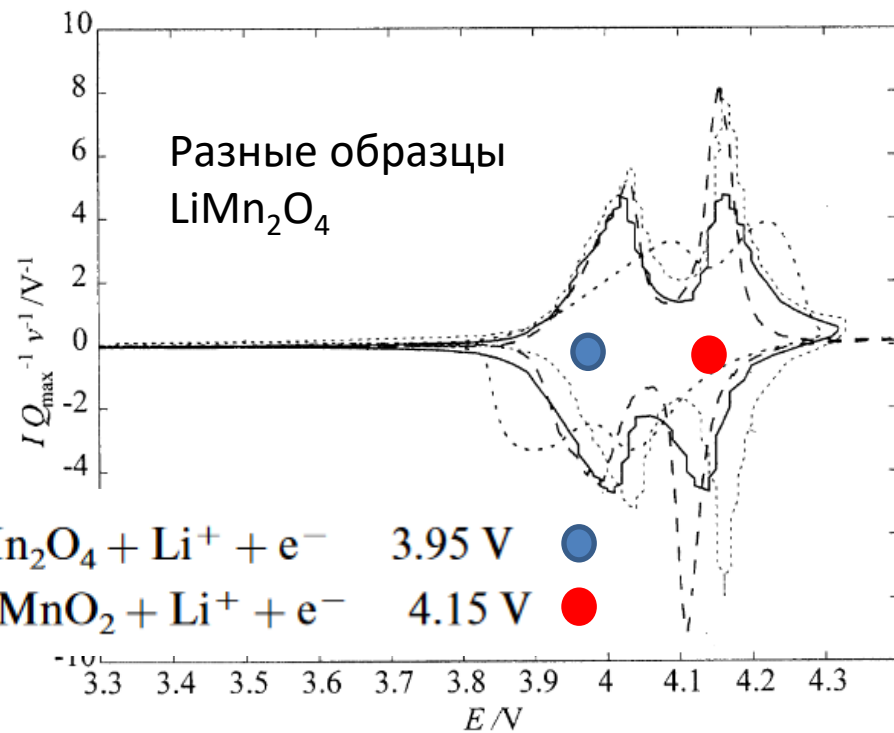
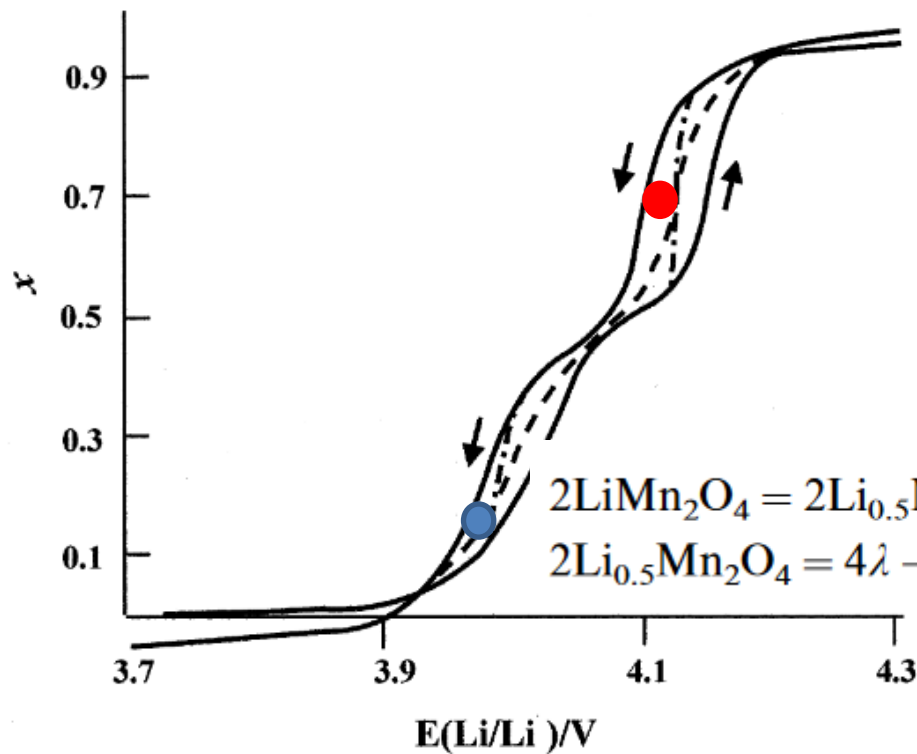


t; Q

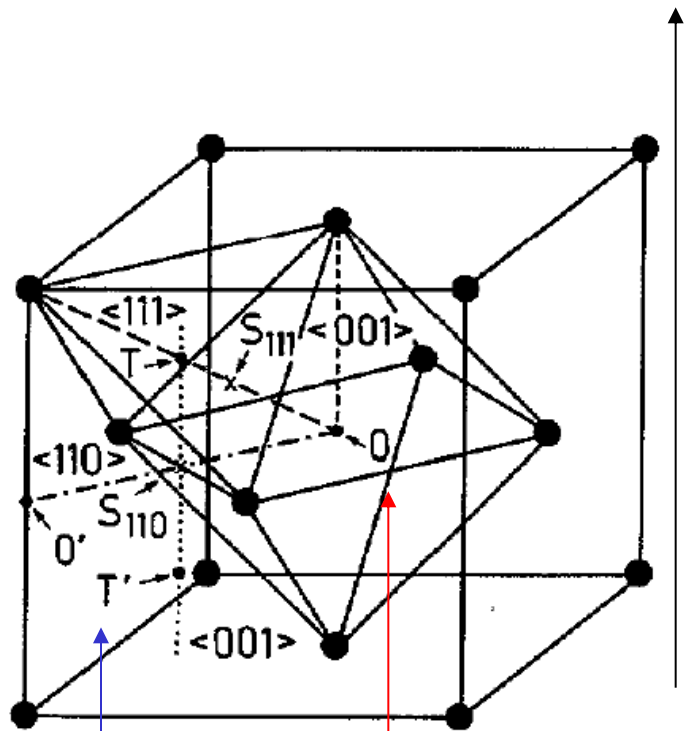




J. Electrochem. Soc.
 146 (1999) 1279



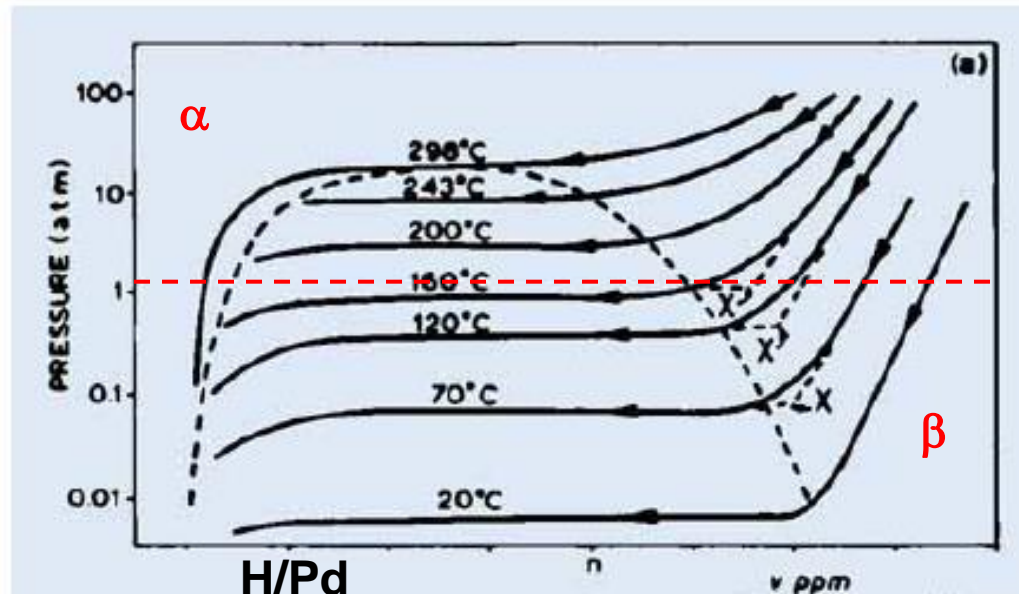
Сорбция водорода металлами - электрохимическая интеркаляция



**Октаэдрические
пустоты ($x \leq 1$ в PdH_x)**

**Тетраэдрические
пустоты ($x > 1$ в PdH_x)**

давление

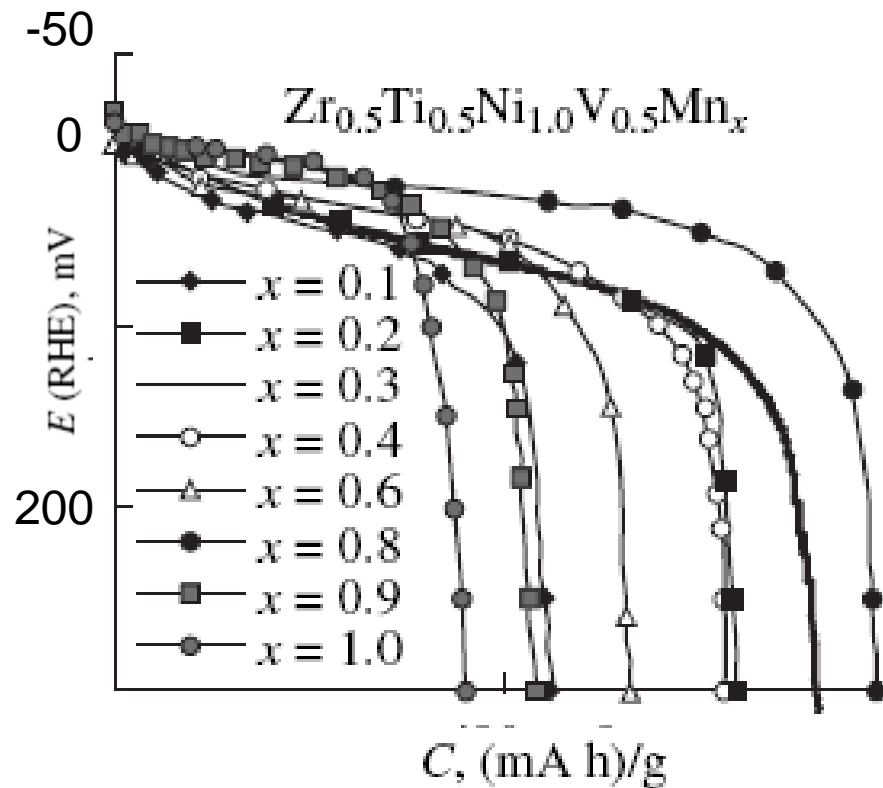
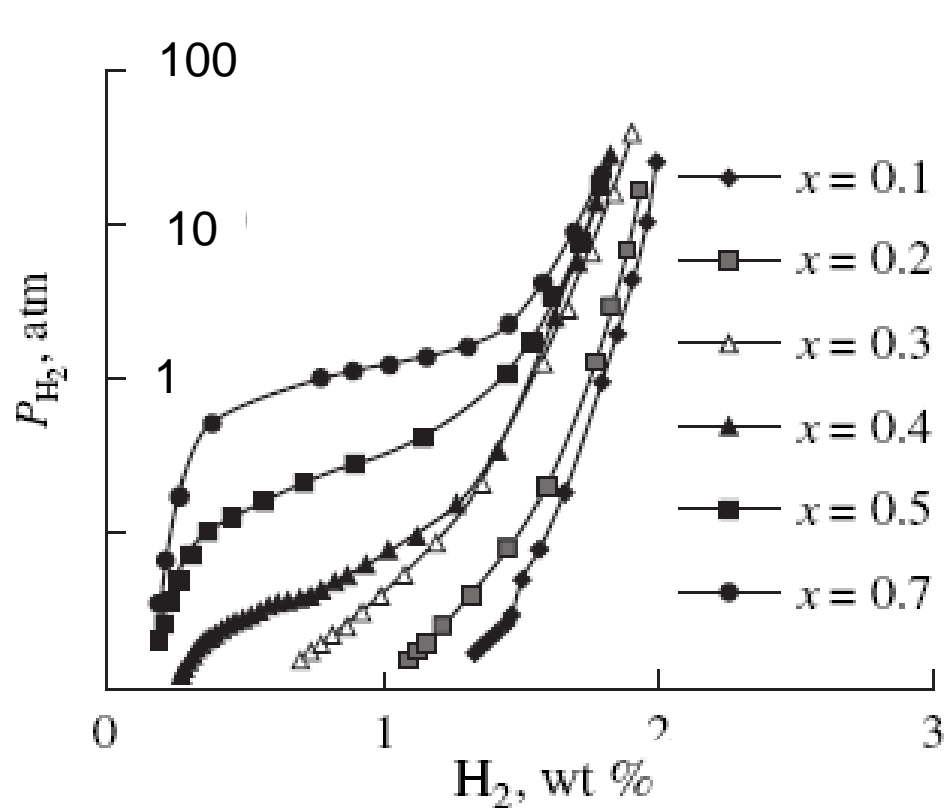


потенциал



PdH_x

Интерметаллиды AB_2 (A = Zr+Ti, B = Ni+V+Mn)



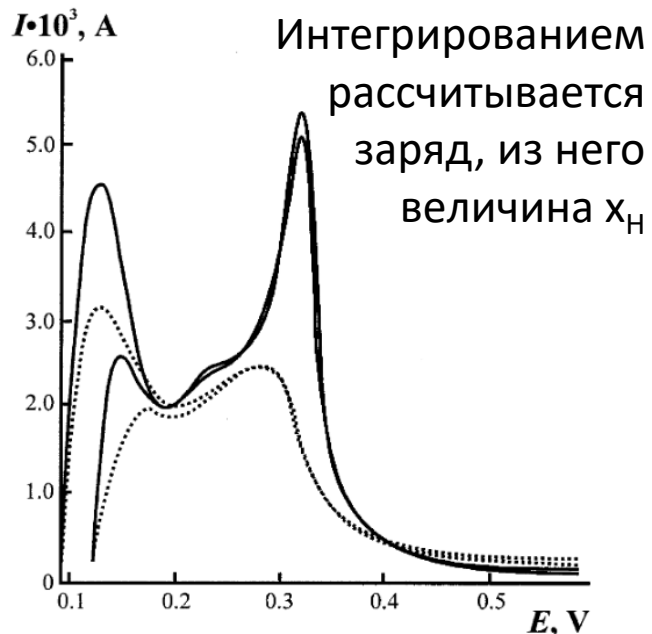
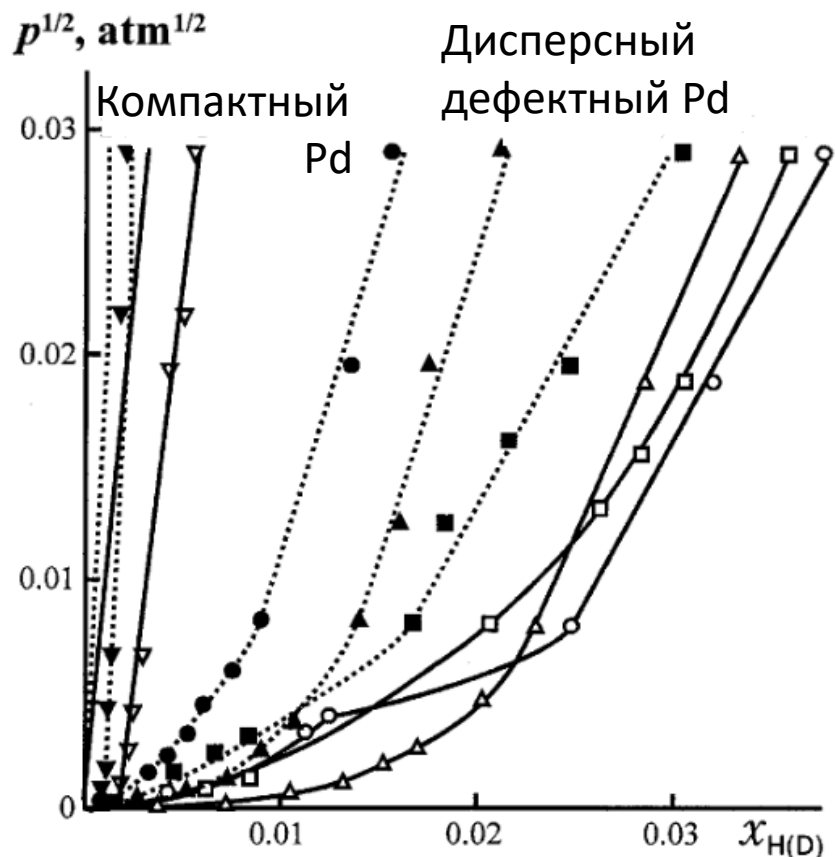
Функционируют в щелочных растворах!

Второй электрод – $NiOOH/Ni(OH)_2$

Сорбция водорода металлами – интеркаляция водорода. Разбавленные гидриды.

“Sievert’s law” – изотерма Сиверта (изотерма Генри)

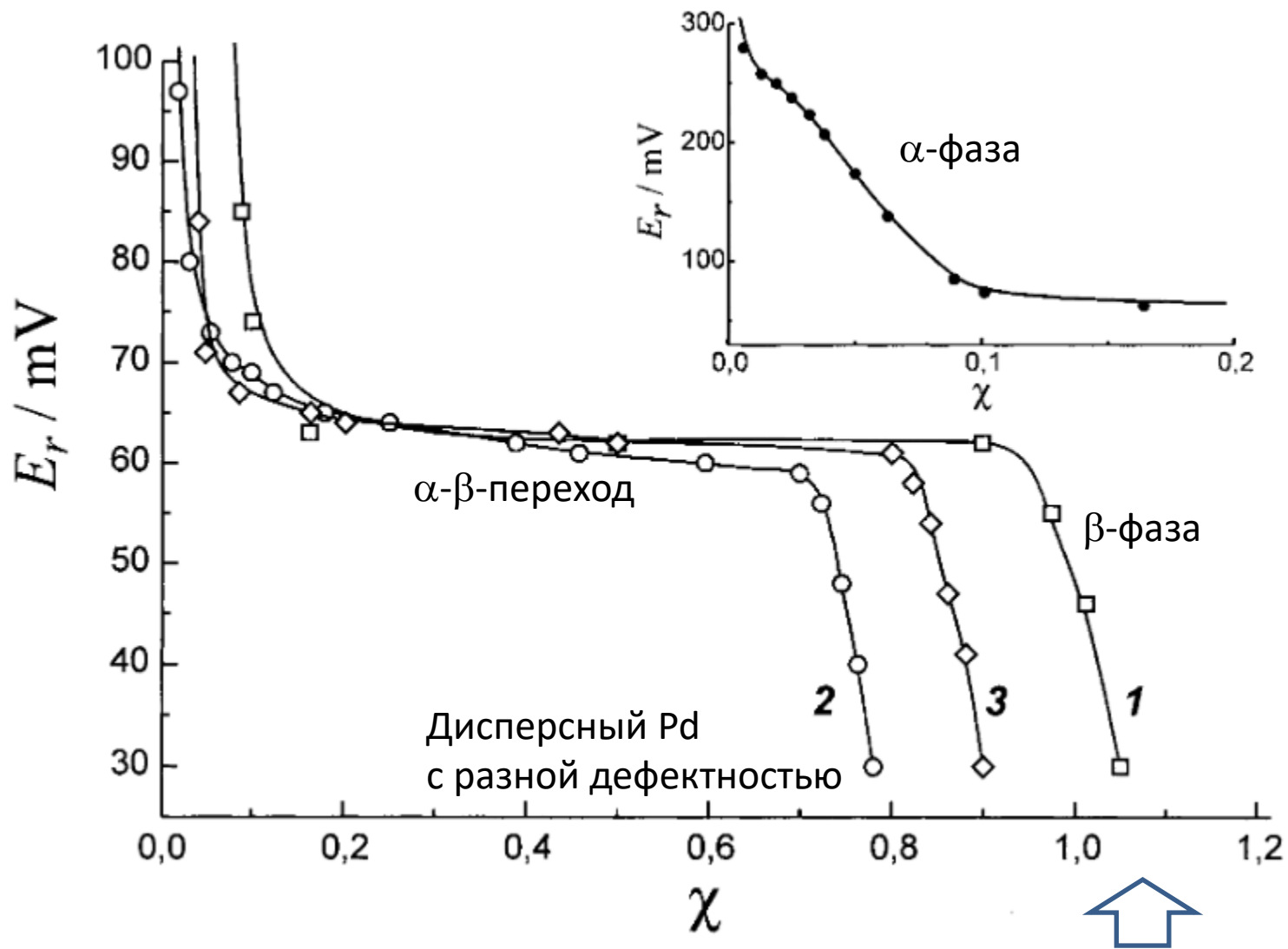
$$x_H = \frac{\sqrt{P_{H_2}}}{K_s} \leftarrow \text{Из уравнения Нернста}$$



$$x_H = r_t^0 \frac{\sqrt{P_{H_2}}}{K + \sqrt{P_{H_2}}} + \frac{\sqrt{P_{H_2}}}{K_s}$$

\uparrow Константа взаимодействия с дефектами \uparrow Константа взаимодействия с решеткой

(пунктир – дейтерий вместо протия)



$$\theta = \frac{1}{f} \ln a_0 p$$

Изотерма
Темкина

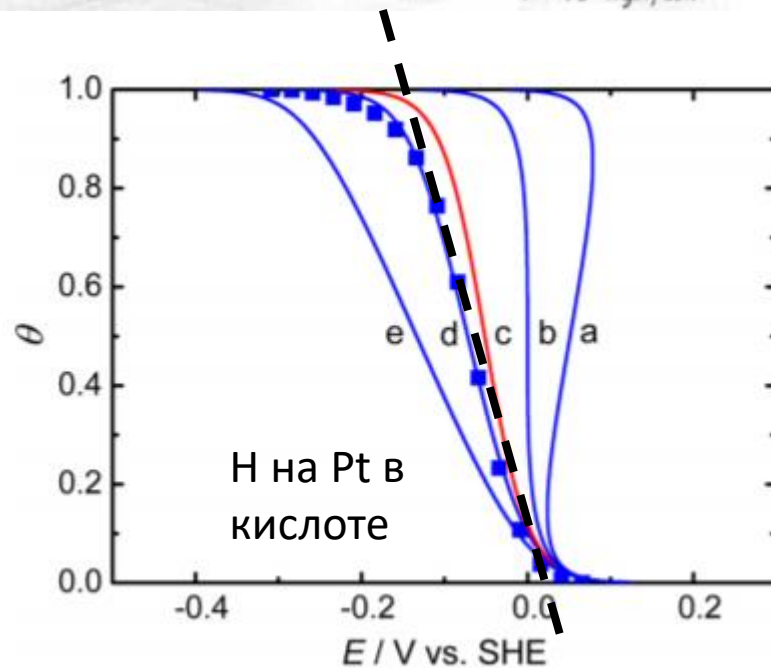
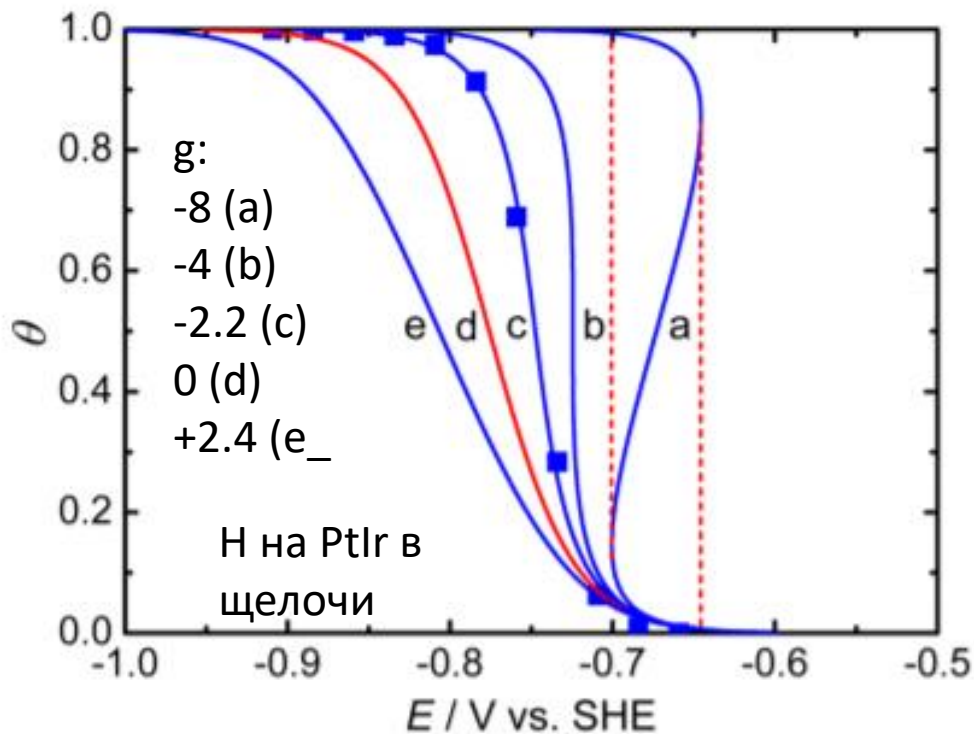
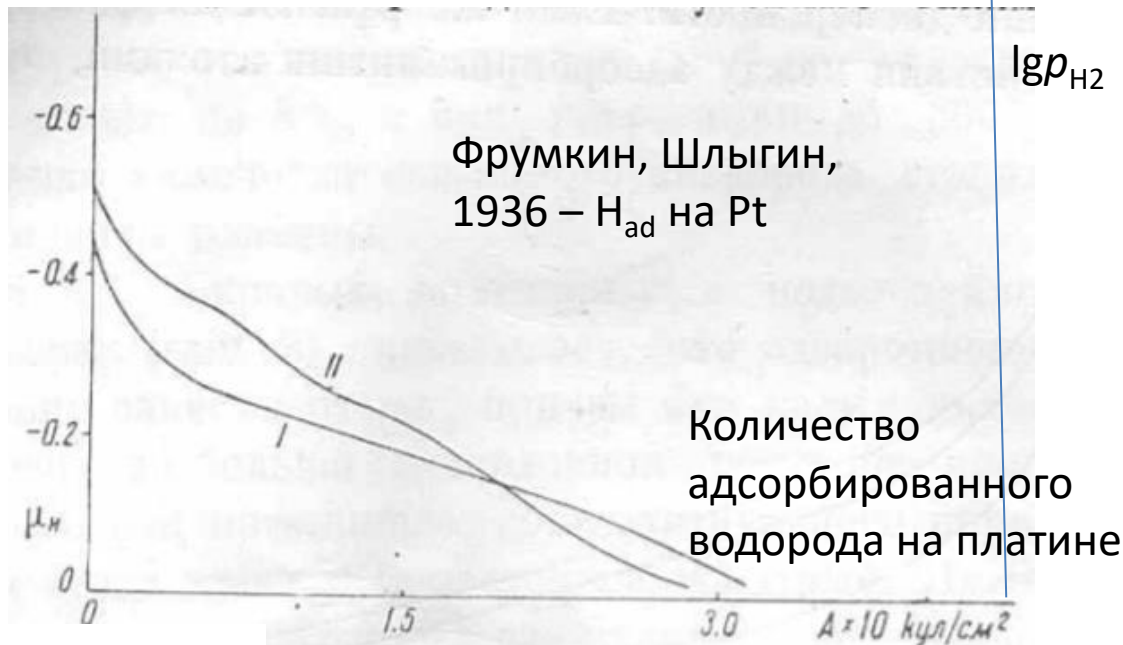


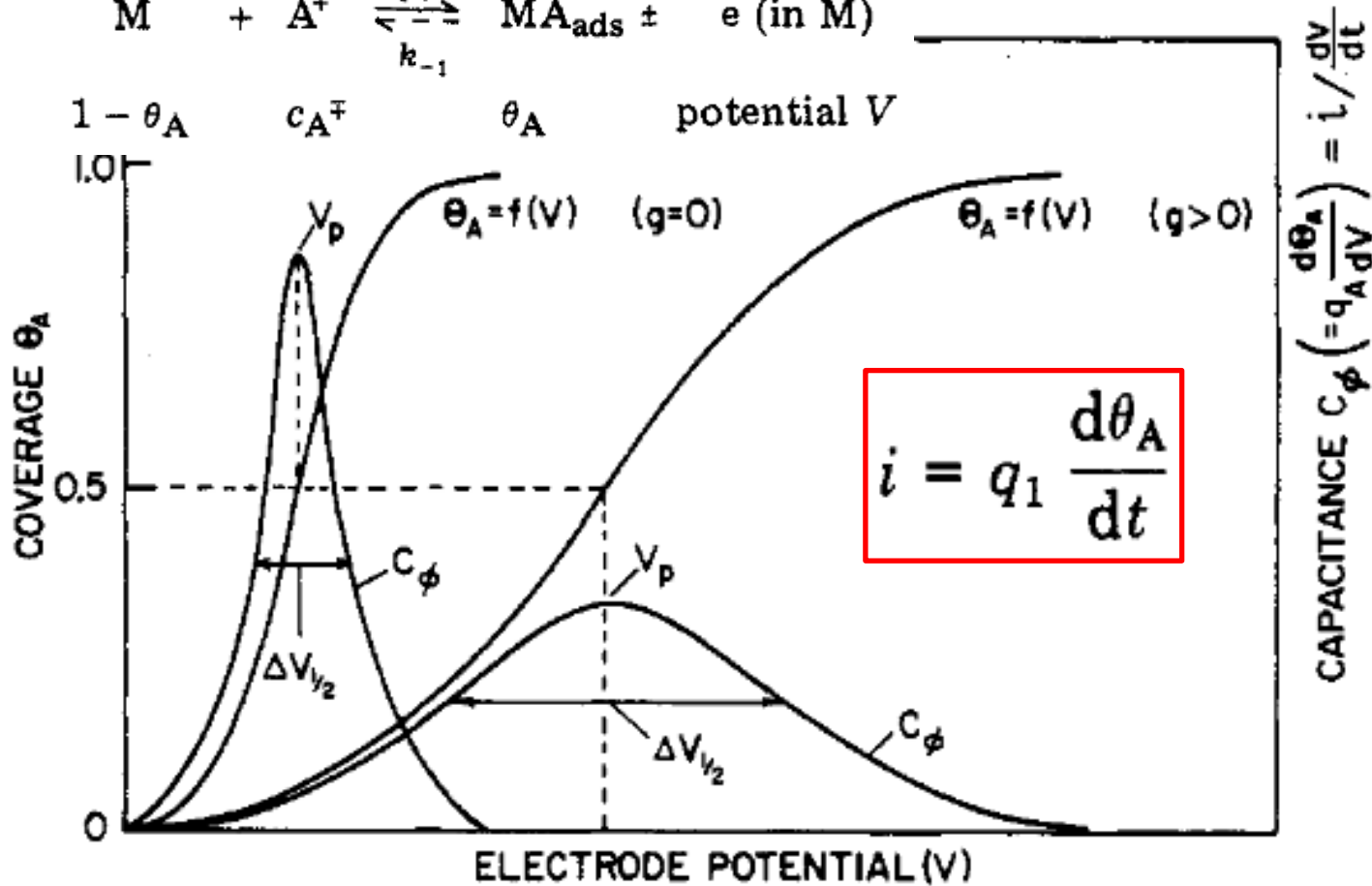
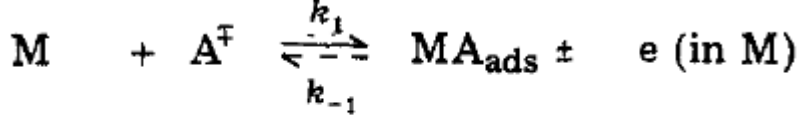
$$X = a + b \ln p_{\text{H}_2}$$



$$\theta = \frac{1}{f} \ln a_0 p$$

Изотерма Темкина (1941) для адсорбции на равномерно-неоднородной поверхности; f – фактор неоднородности





То же для адсорбции на поверхности

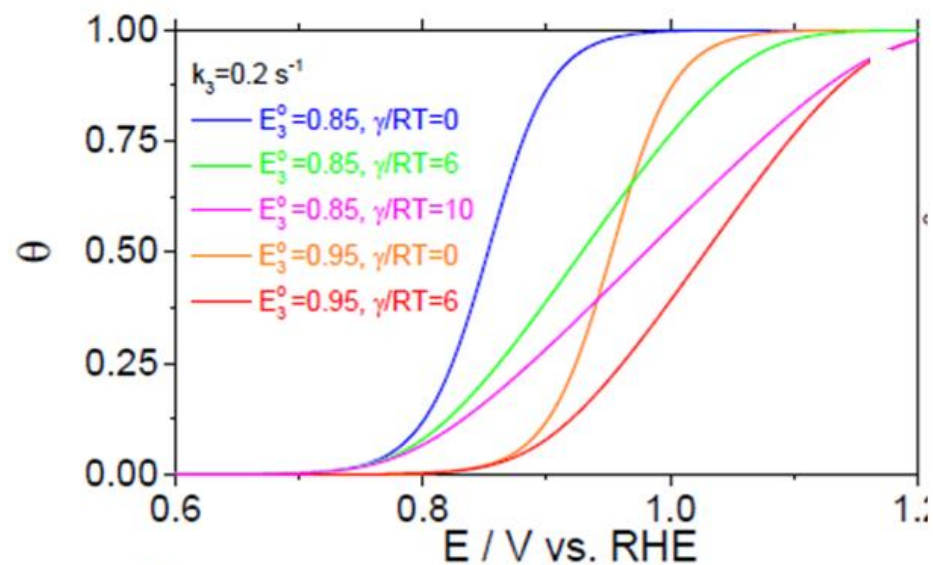
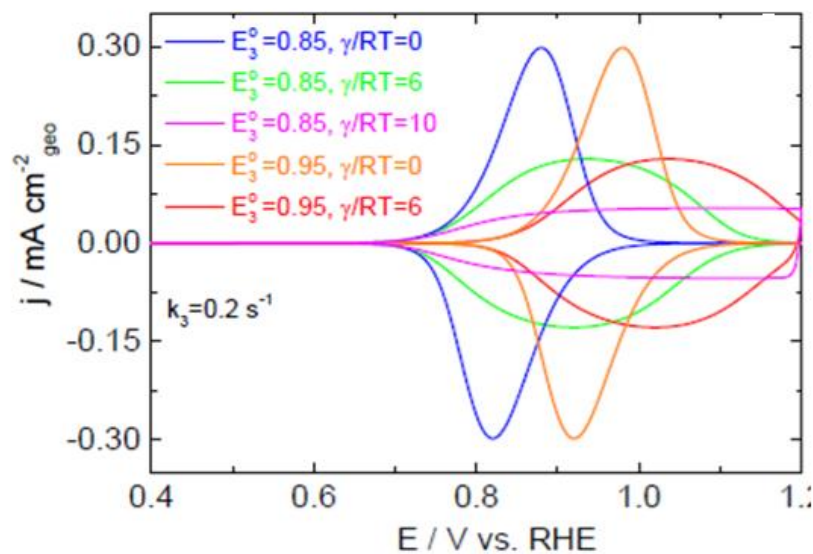
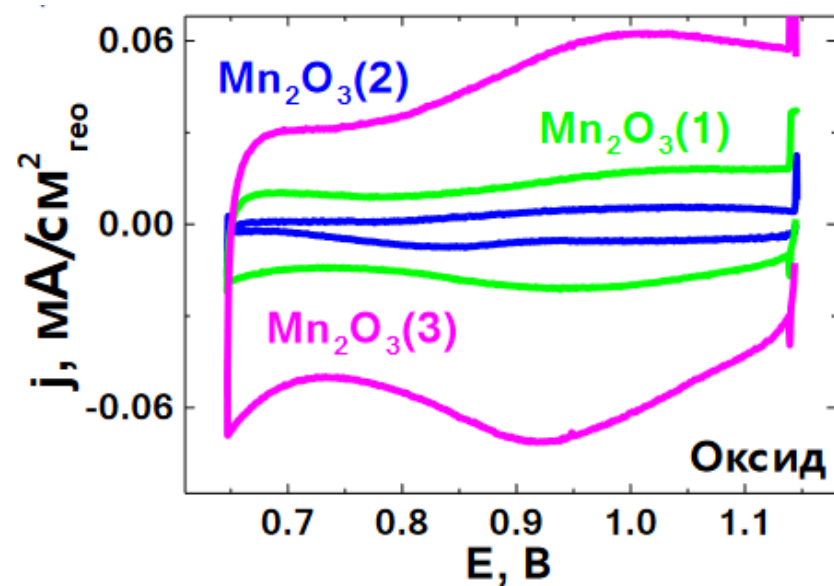
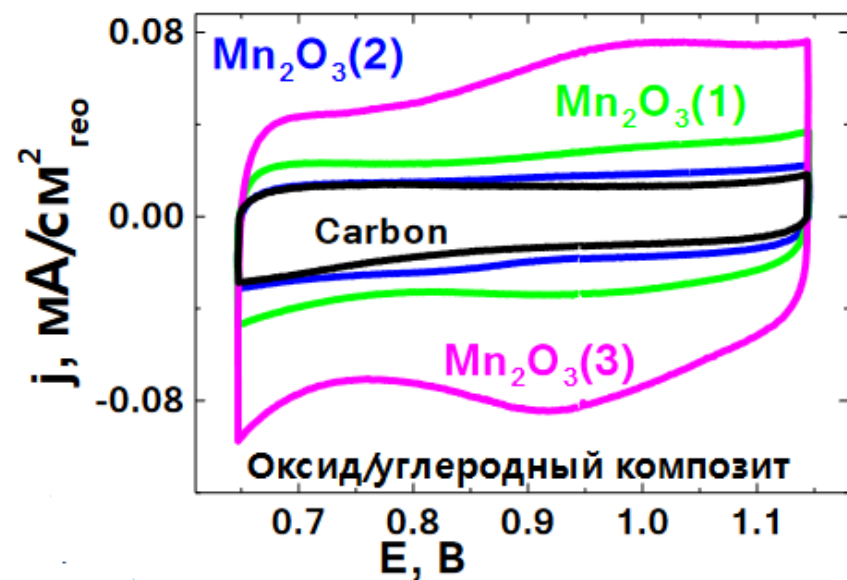
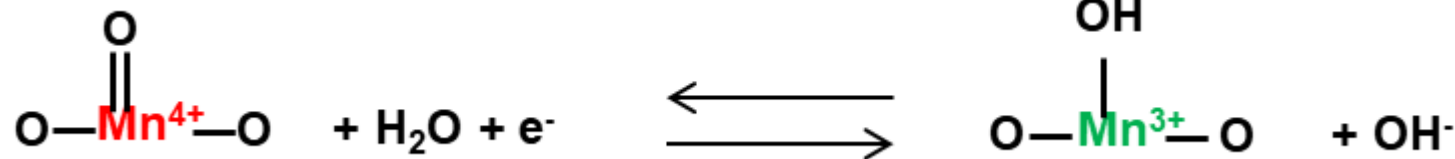
Acc. Chem. Res. 14 (1981) 49

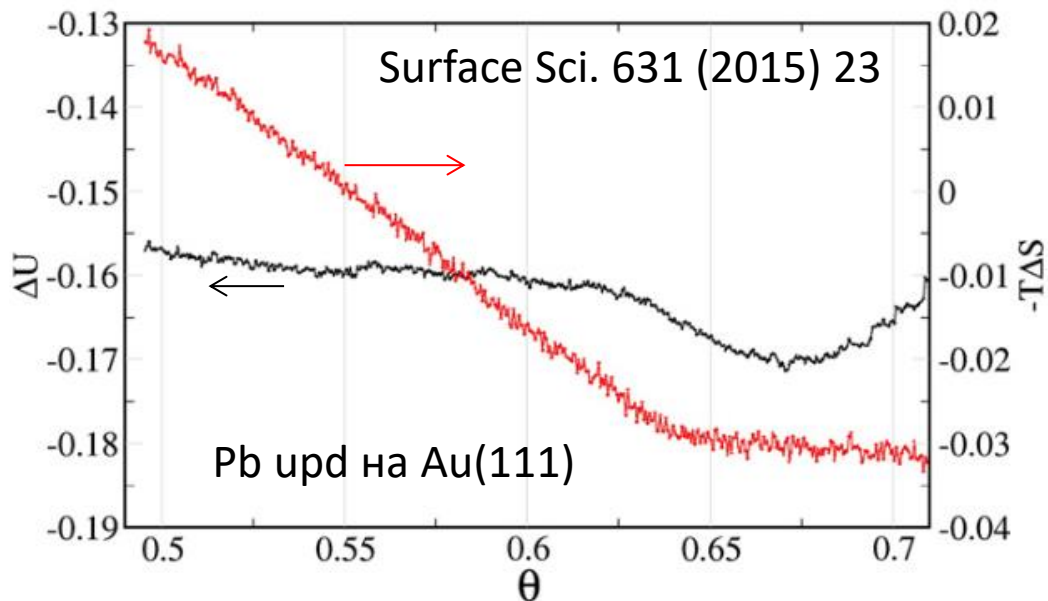
Electrochim. Acta 38 (1993) 1249

$$q_1 \frac{d\theta_A}{dV} = \left(\frac{q_1 F}{RT} \right) \frac{\theta_A (1 - \theta_A)}{1 + g \theta_A (1 - \theta_A)} = C_\phi$$



аттракционная постоянная в изотерме Фрумкина ($g > 0$ при отталкивании)





Computational моделирование
энергий адсорбции

Surface Sci. 631 (2015) 23

| Кластерные модели | Adsorption sites | | |
|--|------------------|----------|----------|
| | “on-top” | “bridge” | “hollow” |
| | | | |
| $-\Delta E_{\text{ads}}, \text{kJ mol}^{-1}$ | 295 | 347 | 338 |
| $z_0(\text{Pt-Cu}), \text{nm}$ | 0.258 | 0.234 | 0.211 |

Задача для Валеры

Сформулировать **условия на параметры изотерм**, при которых равномерная неоднородность поверхности (описываемая изотермой Тёмкина):

<http://www.elch.chem.msu.ru/wp3/wp-content/uploads/2020/02/Murzin2019.pdf>

стр. 391,

эквивалентна наведенной неоднородности, обусловленной латеральными взаимодействиями в адсорбционном слое (описывается изотермой Фрумкина)?