

Pomimo wielu dekad prac naukowców i coraz lepszego instrumentarium badawczego, niektóre z **podwójnych układów równowagi fazowej pozostają ciągle nieznane** lub są tylko teoretycznie przewidziane czy obliczone. Przeszkody ku wytworzeniu i zbadaniu stopów są różne. Często problem stanowią znaczne różnice w temperaturze topnienia składników, ich reaktywność względem elementów konstrukcyjnych aparatury badawczej, znaczne różnice w gęstości (i idąca za tym tendencja do segregacji grawitacyjnej) czy wysoka prężność par powodująca intensywne parowanie, a czasem nawet sublimację składników.

Jednakże to, że stopy czy fazy międzymetaliczne trudno jest wytworzyć czy zbadać, nie oznacza, że one nie istnieją lub też, że ich właściwości nie mogą być ciekawe z punktu widzenia wielu dziedzin techniki. Dlatego **dogłębne zbadanie układów równowagi fazowej (począwszy od podwójnych) jest niezwykle ważne z punktu widzenia rozwoju samej nauki.**

Stopy z układów **Mg-Pt i Mg-Pd**, są trudne do wytworzenia z wyżej wspomnianych powodów. Jednakże właśnie ze względu na znaczne różnice, choćby we właściwościach fizycznych magnezu i platynowców, mogą posiadać **bardzo ciekawe właściwości lub kombinacje właściwości**. Jednym z „wspólnych mianowników” łączących te pierwiastki – jest ich zdolność **interakcji z wodorem** – uważanym za paliwo przyszłości. Pallad ma zdolność pochłaniania wodoru w relatywnie niskiej temperaturze tworząc roztwór stały, a stopy palladu (np. ze srebrem) używane są jako membrany separacyjne, do oczyszczania tego gazu. Z kolei platyna, choć wodoru nie pochłania jest doskonałym katalizatorem – używanym na powierzchni membran PEM w ogniwach paliwowych do separacji cząsteczek wodoru na jony H^+ . Magnez w podwyższonej temperaturze (rzędu 300 – 400 °C) tworzy najpierw roztwór stały, a potem wodorek magnezu, który „gromadzi” w sobie odwracalnie do 7,6 % wodoru masowo. Odwracalnie, znaczy tyle, że wodór z wodorku można zdesorbować przy odpowiedniej temperaturze dla danego ciśnienia. Pojedyncze stopy lub mieszaniny tych pierwiastków były już badane i wykazują powinowactwo do wodoru. Z tego powodu zasadne jest podjęcie **systematycznych** badań, które pozwolą na określenie zdolności do **interakcji z wodorem** większej liczby faz przejściowych i roztworów, które w tych układach mogą występować.

Głównym celem projektu będzie wyznaczenie właściwości termodynamicznych i fizykochemicznych stopów z układów dwuskładnikowych Mg-Pd oraz Mg-Pt a następnie poddanie wytworzonych stopów badaniom pokazującym w jaki sposób są one w stanie reagować z wodorem i jakimi właściwościami charakteryzują się tak wytworzone materiały. Aby zrealizować postawione cele proponowane są następujące działania:

1. Wytworzenie stopów z układów Mg-Pd i Mg-Pt przy pomocy zarówno topienia jak i mechanicznej syntezy w młynku kulowym (w zależności od możliwości).
2. Badania właściwości termodynamicznych wytworzonych stopów.
3. Modelowanie właściwości fizykochemicznych takich jak lepkość i napięcie powierzchniowe stopów z układów Mg-Pd oraz Mg-Pt na podstawie otrzymanych danych termodynamicznych.
4. Badania przemian fazowych zachodzących w wytworzonych stopach podczas ich grzania i chłodzenia.
5. Wyznaczenie entalpii tworzenia faz międzymetalicznych w układach Mg-Pd oraz Mg-Pt wykorzystując obliczenia ab-initio.
6. Obliczenie wykresów fazowych proponowanych układów dwuskładnikowych metodą CALPHAD i programów ThermoCalc lub/i Pandat.
7. Badanie zdolności do reakcji z wodorem wybranych stopów z układów Mg-Pd oraz Mg-Pt.
8. Badanie właściwości produktów reakcji wybranych stopów z wodorem.

Uzyskane eksperymentalne wartości entalpii tworzenia faz międzymetalicznych oraz wartości entalpii mieszania ciekłych stopów z układów Mg-Pd, Mg-Pt zostaną wprowadzone do darmowej bazy danych Entall, dostępnej na stronie internetowej Instytutu Metalurgii i Inżynierii Materiałowej PAN: www.imim.pl.