



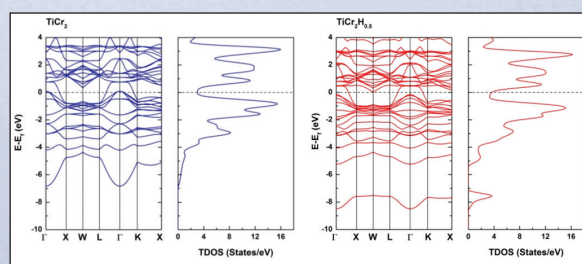
بررسی اثر جذب هیدروژن بر ویژگی‌های ساختاری، ترمودینامیکی و الکترونیکی ترکیبات دوتایی XCr_2 ($X=Ti, Zr$)

رضا سرحدی

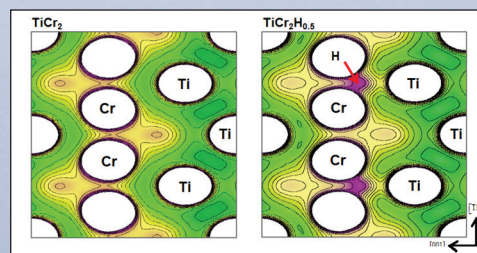
آزمایشگاه مغناطیس و ابررسانایی، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه بیرجند
ارائه شده در: یازدهمین کنفرانس ماده چگال انجمن فیزیک ایران، سال ۱۳۹۱

در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی و بر پایه‌ی رهیافت شبه پتانسیل بررسی شده‌است. مقادیر ثابت شبکه، مدول حجمی و گرمای شکل‌گیری که برای ترکیبات غیرهیدریدی XCr_2 به‌دست آمده‌اند در تطابق خوب با داده‌های تجربی هستند. با جذب هیدروژن، شبکه‌ی بلوری این ترکیبات انبساط پیدا می‌کند و مدول حجمی که معیاری از درجه‌ی سختی آلیاژ است، کاهش می‌یابد. این نتیجه‌ی نظری در توافق با نتایج تجربی است چرا که این آلیاژها قبل از جذب هیدروژن بسیار سخت هستند ولی پس از جذب/واجذب هیدروژن، به پودرهای بسیار نرم تبدیل می‌شوند. پیش‌بینی می‌شود که واکنش جذب هیدروژن در این ترکیبات گرمازا باشد. مقدار زیاد گرمای آزادشده در نتیجه‌ی جذب هیدروژن، اندیشه‌ی استفاده از این آلیاژها در مبدل‌های حرارتی-هیدریدی را پیش می‌آورد. فضای بین جایگاه‌های نوع 2A2B بیشترین احتمال جذب هیدروژن را دارد و این نتیجه با نتایج حاصل از پراش نوترون در توافق است. جذب هیدروژن ساختار الکترونیکی (ساختار نواری، چگالی حالت‌ها و چگالی بار الکترونی) این ترکیبات را تغییر می‌دهد طوری که پس از جذب هیدروژن، تراز فرمی (E_F) به سمت انرژی‌های بیشتر جابه‌جا می‌شود. معنی جابه‌جایی تراز فرمی این است که هیدروژن ترازهای خالی زیر تراز فرمی را پر کرده و انرژی تراز فرمی را افزایش داده است. نتیجه می‌توان گفت هیدروژن به صورت دهنده‌ی الکترون رفتار می‌کند. با بررسی منحنی‌های چگالی حالت‌های جزئی و چگالی بار الکترونی، می‌توان مشخصه‌ی پیوندهای جهت‌دار d-d را به این ترکیبات نسبت داد. ساختار نواری، چگالی حالت‌ها و چگالی بار الکترونی این دو ترکیب $TiCr_2$ ایزومری شبیه یکدیگر هستند. منحنی‌های مربوط به ترکیب $TiCr_2H_{0.5}$ و در شکل نمایش داده شده‌اند.

امروزه استفاده از هیدروژن به عنوان حامل پاک و تمام‌نشدنی انرژی، جایگاه ویژه‌ای در توسعه‌ی فناوری انرژی‌های نو و به‌ویژه فناوری سلول سوختی پیدا کرده‌است. با این حال مهم‌ترین چالش پیش روی پیشرفت این فناوری، نحوه‌ی ذخیره کردن هیدروژن است. ترکیبات بین فلزی فاز لاهه با واحد فرمولی AB_2 ، به‌علت جذب/واجذب هیدروژن در نزدیکی دمای اتاق و فشار اتمسفر، گزینه‌های مناسب برای ذخیره کردن هیدروژن در مواد جامد محسوب می‌شوند. در این بین، ترکیبات بر پایه‌ی کروم XCr_2 ، از جمله $ZrCr_2$ و $TiCr_2$ ، به‌علت مقاومت زیاد در برابر خوردگی و اکسیدشدن و هم‌چنین قدرت جذب زیاد هیدروژن، کاربردهای فراوانی در صنعت پیدا کرده‌اند. بررسی نظری این ترکیبات هم‌گام با فعالیت‌های تجربی، نتایج مناسبی را جهت درک سازوکار میکروسکوپی جذب و نشر هیدروژن به‌دست می‌دهد. در این کار پژوهشی، ویژگی‌های ساختاری، ترمودینامیکی و الکترونیکی ترکیبات ایزومری $XCr_2H_{0.5}$ ($X=Ti, Zr$) و هیدریدهای آنها XCr_2 ($X=Ti, Zr$)



(الف) ساختار نواری و چگالی حالت‌های کل



(ب) چگالی بار الکترونی در صفحه‌ی (۱۱۰)

همکاران:

هادی عربی، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه بیرجند/گروه فیزیک، دانشگاه فردوسی مشهد
فائز پورآرین، دانشگاه کارنگی ملون آمریکا Carnegie Mellon
محل انجام کار: گروه فیزیک، دانشگاه بیرجند