دراسة تأثير الاستبـــدال الذري في هدريـــد الليثيوم 1x1x2 LiH_225
(الاستبدال بواسطة المعادن القلوية Na، K و Rb)

جامعـــــــة قاصدي مرباح ورقلة

كلية الرياضيات و علوم المادة

قسم الفيزياء

مخبر تطوير الطاقات الجديدة و المتجددة في المناطق الجافة و الصحراوية

تخصص ثانية ماستر فيزياء مواد

من اعداد الطالبة: بن عثمان شيماء

تحت اشراف الاستاذ: محمدي لزهر

المشرف المساعد الاستاذة : شعيب هجيرة

1- ملخص العمل:

سنتاول في هذه الدراسة تأثير الاستبدال الذري على هدريد الليثيوم 1x1x2LiH _225 وسندرس مدى تأثير حقل الاستبدال الذري بواسطـــة المعادن القلويـة على هدريد الليثيوم للحصول على تخزين جيد و سهلة للهيدروجين بالاعتماد على النظرية التابعية للكثافة DFT و طريقة الموجة المستوية المتزايدة خطيا والكمون الكامل FP-LAPW . ووجدنا عند الاستبدال الذري ان الكسر الكتلي للهيدروجين Gravimétrie (G) تتناقص وفق الاستبدال من Na الى Rb ووجدنا ايضا أن الهيدروجين يمتص و يستخرج بسهولة عند الاستبدال من Na الى Rb

كلمات مفتاحية : النظرية التابعية للكثافة DFT، الموجة المســتوية المتزايدة خطيا والكمون الكاملFP-LAPW ، هدريد الليثيوم LiH-225، الليثيوم Li-229، برنامج WIEN2k

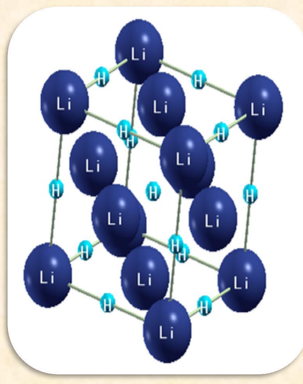
2.1-المقدمة

يعد الهيدروجين أحد اهم أشعة الطاقـة في العصر الحديث. ونظـرا لاهميته الكبيرة و توفـره في الطبيعة إلا ان تخزينه جد صعب نظـرا لكثافته الحجميـة الصغيرة في الشـروط العادية، حيـث تصل كثافتـه إلى $0.09\ kgm^{-3}$ من ما يجعل تخزينه على شكل غاز يتطلب خزانات كبيرة الحجم للتخزين أما تخزينه على شكل سائل يطرح مشكل التكلفة الغالية و الخطر ونظرا لذالك اصبح من الضروري ايجاد طرق فعالة و قليلة التكلفة لتخزينه بكمية كبيرة و بسهولة. يعد تخزين الهيدروجين في المواد الصلبة عن طريق الامتصاص على شكل هدريدات خفيفة الوزن أكثر فعالية نظرا لحفظها الهيدروجين في شكل ذري في دراستنا هذه سوف نتطرق الى تأثير الاستبدال الذري بواسطة المعادن القلوية على هدريد الليثيوم 1x1x2LiH _225 الذي هو نفسه Li7XH8 مع X: Na، K و Rb .

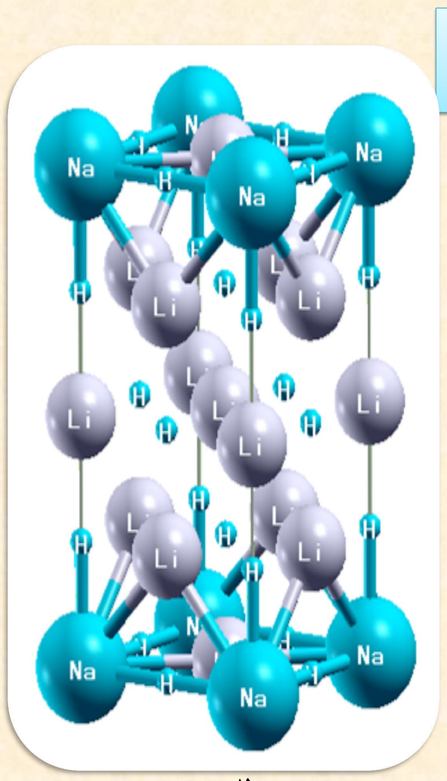
2. طريقة الحساب:

- نظرية الدالة الوظيفية للكثافة (DFT)
- طريقة الموجة المستوية المتزايدة خطيا والكمون الكاملFP-LAPW
- في هذا العمل استعملنا برنامج WIEN2k

1.2- الليثيوم Li و هدريد الليثيوم Li7XH8:



هدريد الليثيوم



هدريد الليثيوم Li7NaH8

3. النتائج والمناقشات:

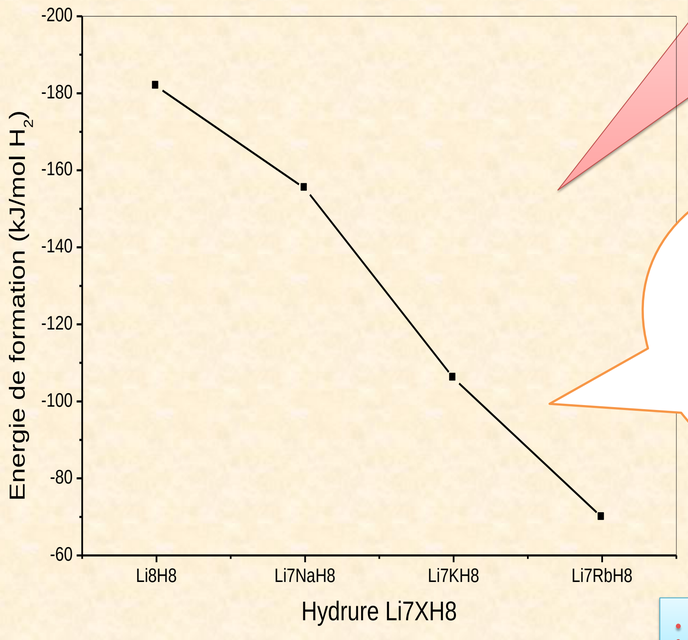
1.3- الدراسة البنيوية:

نوع الهدريد	a (A°)	b (A°)	c (A°)	E_{tot} (Ry)
LiH-225	4.0090	4.0090	4.0090	-16.27
LiH-225 [6]	4.065	4.065	4.065	16.23
Li8H8	4.009	4.009	8.018	-130.1733
Li7NaH8	4.155	4.155	8.311	-439.91
Li7KH8	4.574	4.574	9.148	-1319.15
Li7RbH8	4.410	4.410	8.821	-6077.57

2.3- طاقة التشكل:

$$7Li + X + 4H_2 \leftrightarrows Li_7XH_8$$

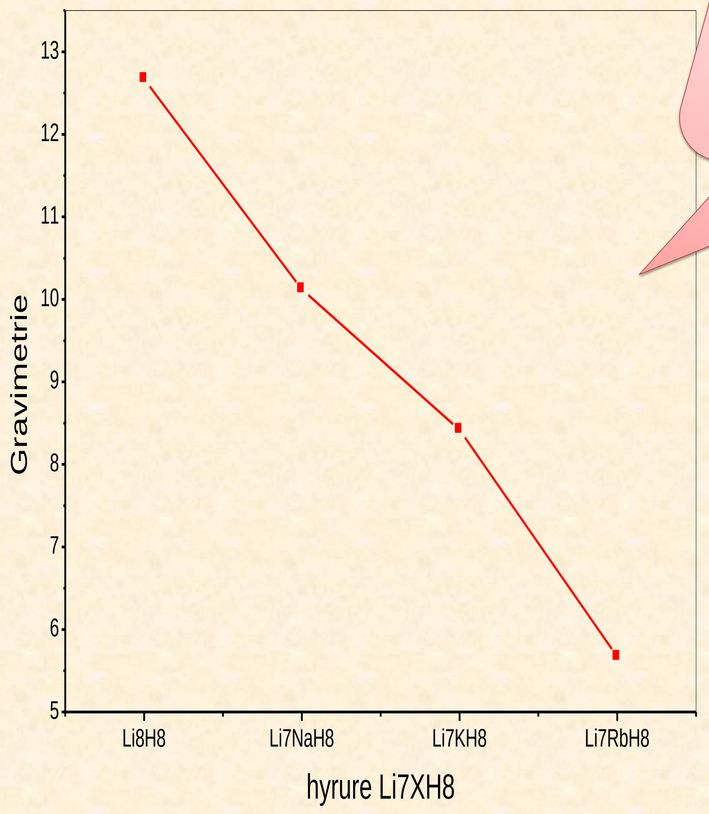
$$E_f = \frac{1}{4}E_{tot}(Li_7XH_8) - \frac{7}{4}E_{tot}(Li) - \frac{1}{4}E_{tot}(X) - 2.32$$



من خلال المنحنى نلاحظ أن طاقات التشكل تتناقص وفق الاستبدال من Na الى Rb

الاستبدال Rb في الهدريد Li7XH8 يخزن ويطرح الهيدروجين بسهولة مقارنة مع باقي الاستبدالات

3.3- الكسر الكتلي الهيدروجيني:



من خلال المنحنى نلاحظ أن الكسر الكتلي الهيدروجيني يتناقص وفق الاستبدال من Na الى Rb

4- الخلاصة:

- ثوابت الشبكة المحسوبة للمركب LiH_225 مقاربة للقيم التجريبية
- عند الاستبدال الذري الكسر الكتلي للهيدروجين Gravimétrie (G) تتناقص وفق الاستبدال من Na الى Rb
- ووجدنا ايضا أن الهيدروجين يمتص و يستخرج بسهولة عند الاستبدال من Na الى Rb
- تخزين و طرح الهيدروجين من الاستبدال الاول الى الاستبدال الثاني يكون بسهولة يوافقه فقدان تدريجي صغير في كمية الهيدروجين

5- قائمـة المراجـــع:

1/- د.حسن عبد الحي /كيمياء المجموعات الرئيسية

2/ -كيمياء المعادن الانتقالية / جامعة دمشق 1993

3/ - بري السعدي . شهادة الدكتوره في العلوم . جامعة سطيف 2013

4/-Blaha P., Schwarz K., and Luitz J., Wien2k;an improved and updated version of Unix original copyrighted Wien2k code, which was published by Blaha P., Schwarz K. Sorintin, P. and Tricky S. Compute, B. Phys. Commun. 59, 399 (1990).

5/ -.*MEZIANI, Thése de Doctrat, Université Badji Mokhtar_Annaba (2012) .A*

6-/ Herbst Jr , Hector Jr . Energetics of The Li amide / Li imide hydrogène storege reaction . Phys rev B 2005; 72 : 125120