

Hydrogène dans les systèmes métalliques

Alexandre Lebon, Maître de Conférences (CNU28)

Laboratoire de Magnétisme de Bretagne, CNRS FRE 3137

11 décembre 2009, Journée Centre de Calcul

Modélisation de la structure électronique

Objectifs: Comprendre les propriétés structurales et électroniques des matériaux.

Modèles:

- 1- Approximation de Born-Oppenheimer.
- 2- Théorie de la fonctionnelle de densité.
- 3- Approximation des pseudopotentiels.

Modélisation de la structure électronique

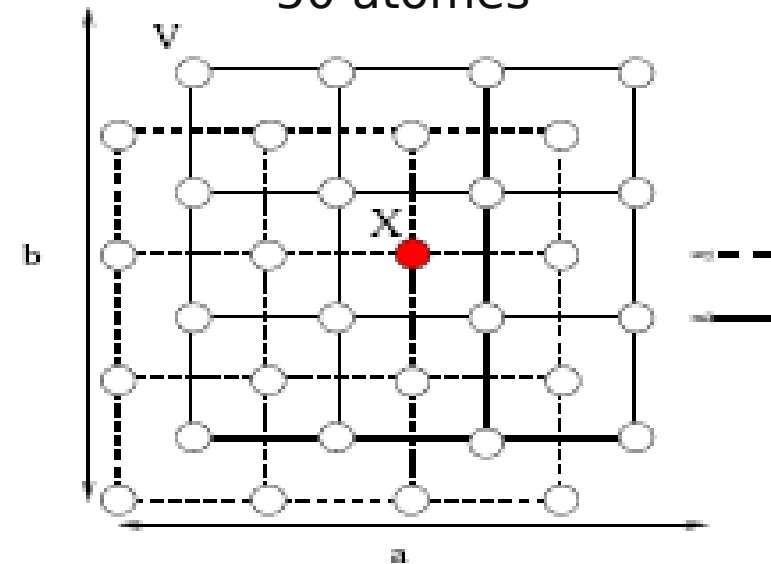
Mise en oeuvre:

Codes de calculs

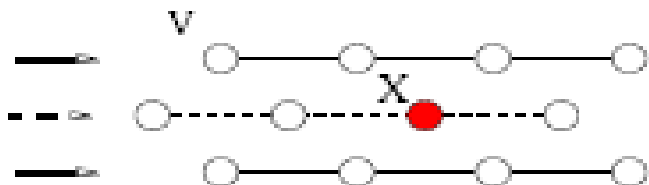
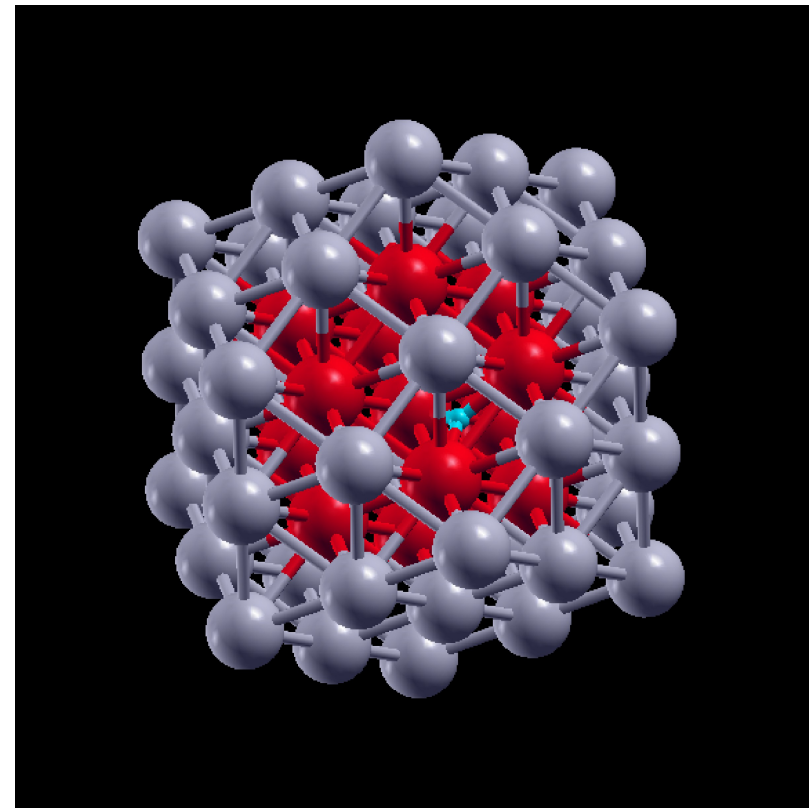
SIESTA Spanish initiative for electronic simulations of thousand of atoms

VASP Vienna Ab-initio Simulation Program

50 atomes



147 atomes



L'hydrogène dans les systèmes métalliques

Ti-V-Cr

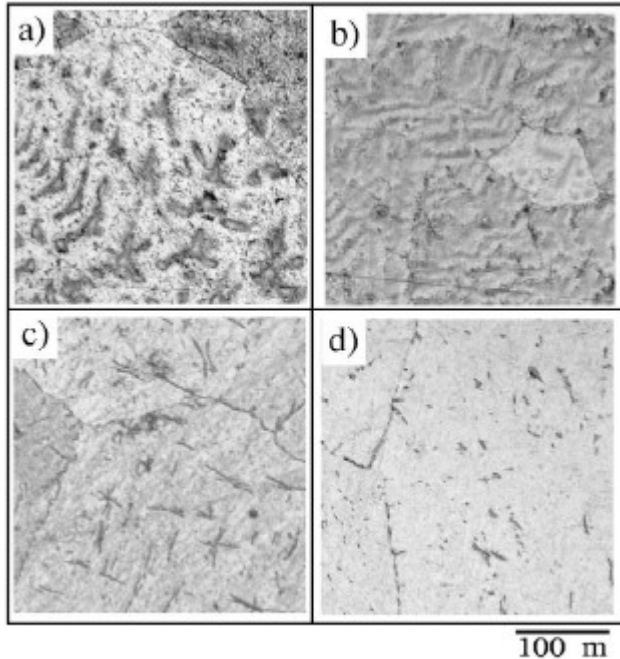


Fig. 2. Optical microstructures of Ti-Cr-V samples: (a) AC; (b) HT; (c) FZ20; and (d) FZ12.

Capacité de stockage de H améliorée pour V distribué de façon homogène dans l'alliage

H. Arashima et al J. Alloy and Compounds
356-357 405-408 (2003)

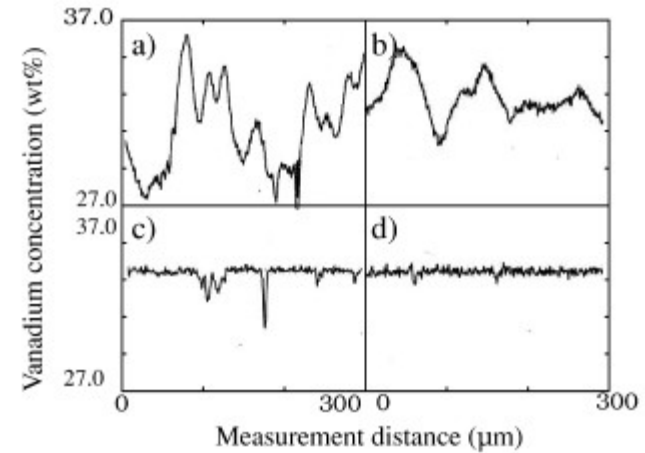


Fig. 3. Vanadium distribution of the Ti-Cr-V samples with EPMA: (a) AC; (b) HT; (c) FZ20; and (d) FZ12.

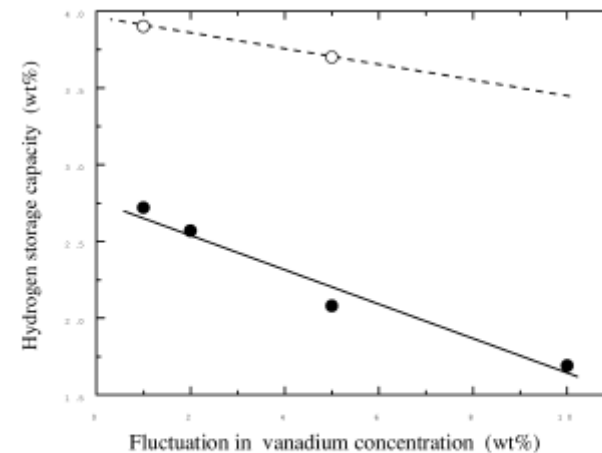


Fig. 5. Correlation of the effective hydrogen capacity with the fluctuation in vanadium concentration. O, Maximum hydrogen capacity; ●, Effective hydrogen capacity.

L'hydrogène dans les systèmes métalliques

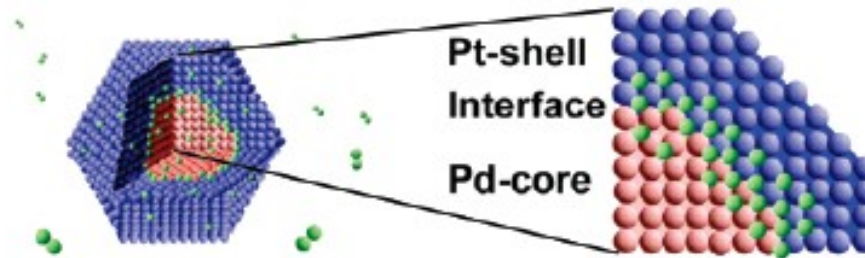


Figure 1. Image of hydrogen storage of Pd/Pt nanoparticles. (green = hydrogen, red = Pd, blue = Pt).

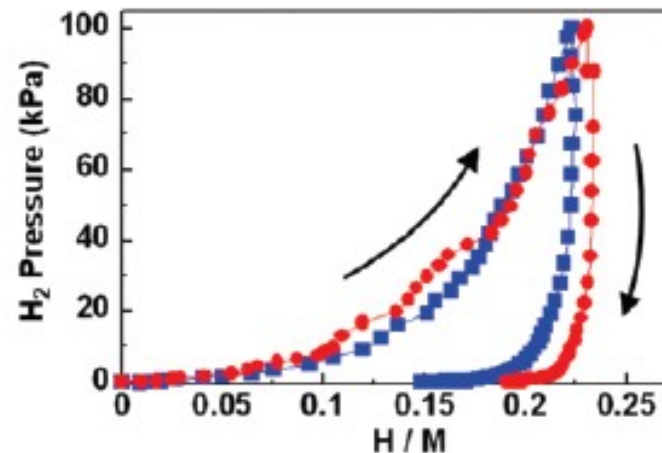


Figure 2. PC isotherms of Pd (blue) and Pd/Pt nanoparticles (red) at 303 K. Isotherm was measured according to the direction of the arrows.

K. Kobayashi *et al.* JACS **130**(6) 1818-19 (2008)

- Des systèmes nanométriques pour le stockage de H
- Modification des propriétés de Pt et Pd dans un agrégat

L'hydrogène dans les systèmes métalliques

Structure

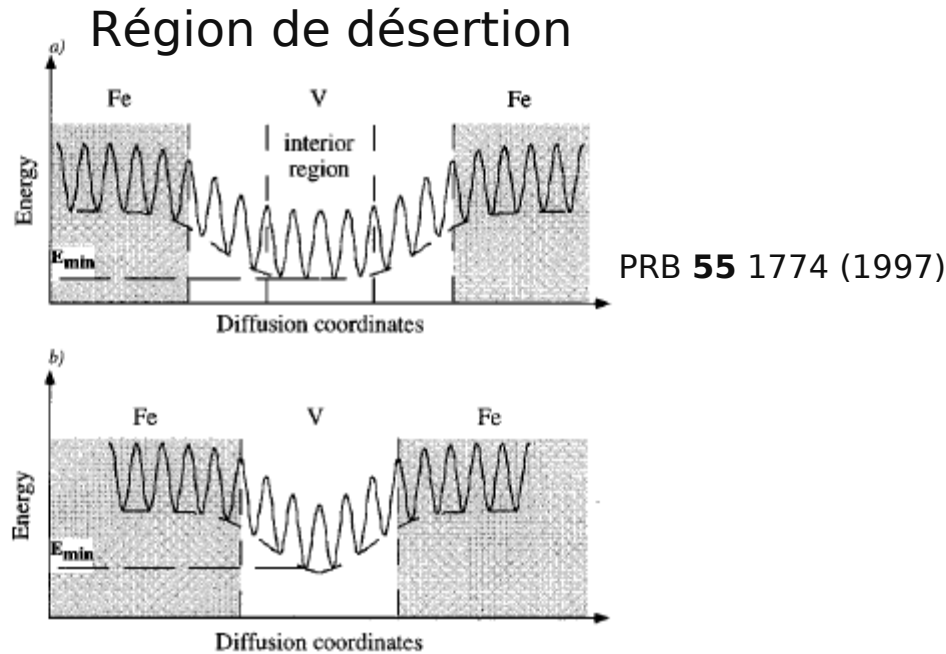


FIG. 11. A schematic view of the potential seen by a diffusing H atom. The shadowed areas are the iron layers surrounding the vanadium, which is (a) 10 ML and (b) 6 ML thick, respectively. In (a) the energy difference between monolayers 3 and 4 from the interface is 97(5) meV. E_{min} in (b) is 87(6) meV higher than in (a).

Expansion suivant c

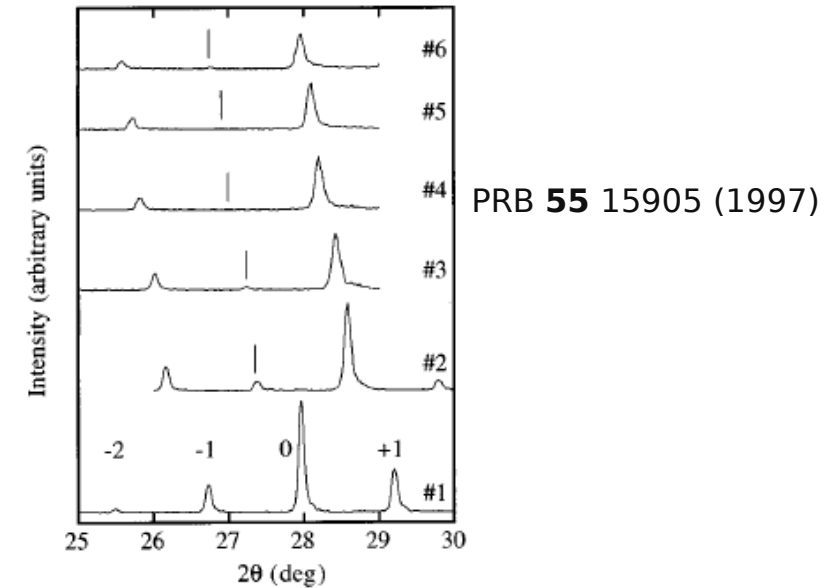


FIG. 2. X-ray diffractograms measured at 70 °C. The labeling refers to the pressure used: No. 1 is one of the two vacuum references, No. 2 = 5 torr, No. 3 = 25 torr, No. 4 = 100 torr, No. 5 = 225 torr, and, finally, No. 6 = 625 torr. The vertical line shows the position of the main (002) peak, denoted by 0 in spectrum No. 1.

électronique

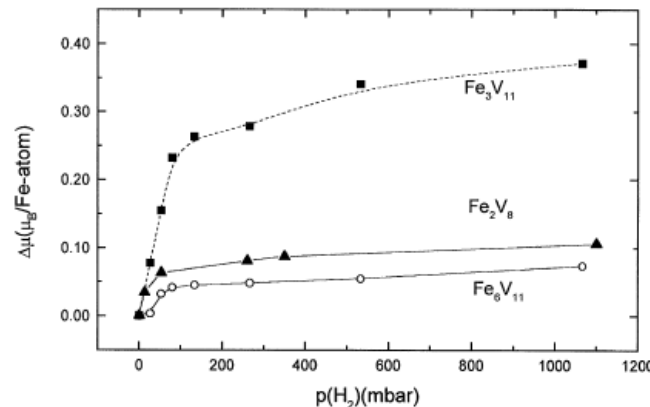
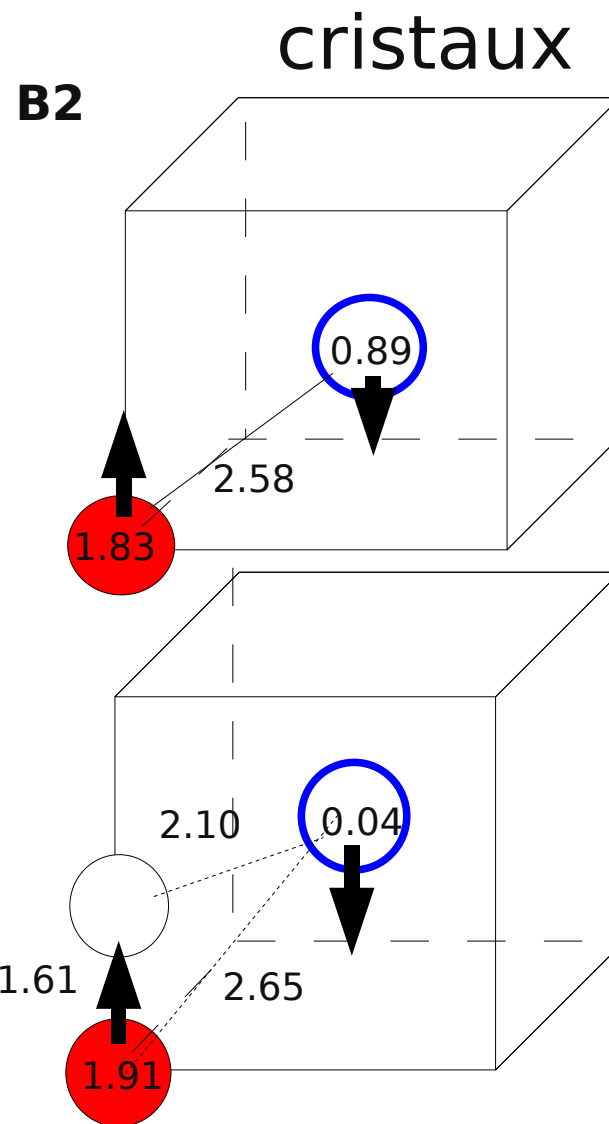
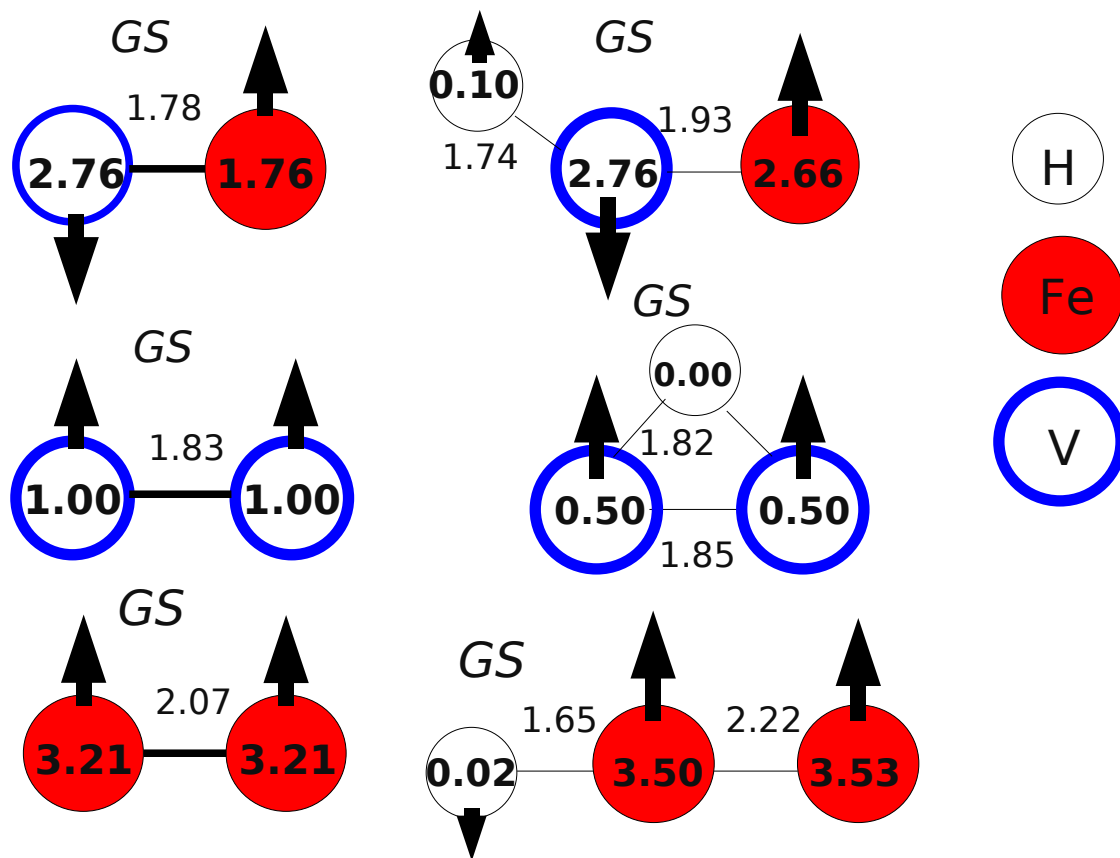


Fig. 3. Change of the atomic magnetic moment per Fe atom after saturating the samples with hydrogen at different H_2 pressures. The hydrogen loading was done at room temperature, the magnetization has been measured at 4.2 K.

Moment de Fe ↗

JMMM 225 373 (2001)

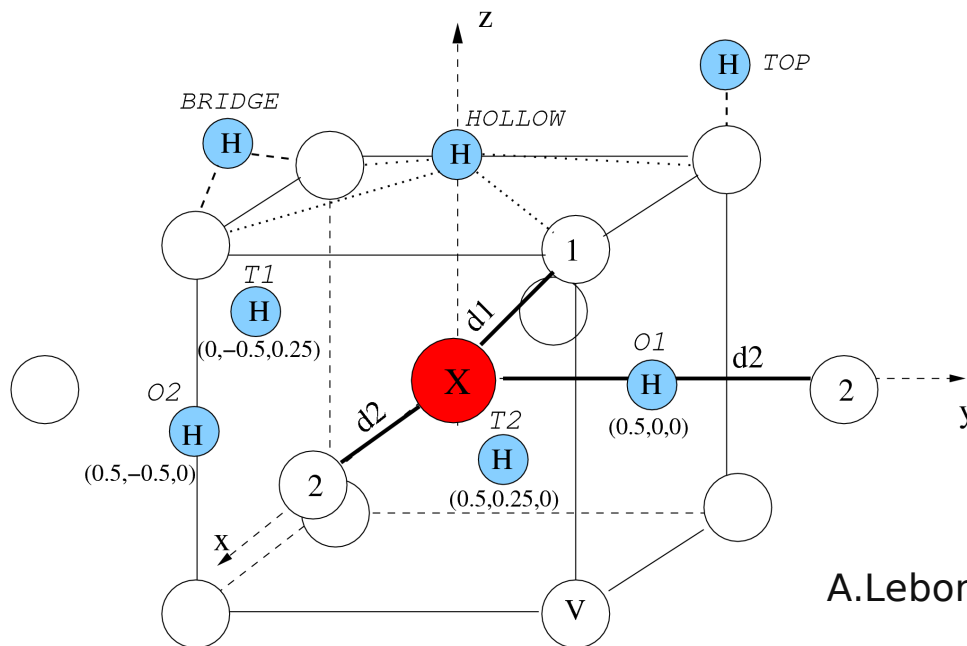
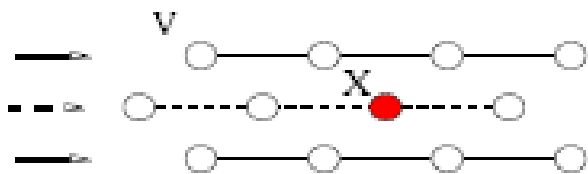
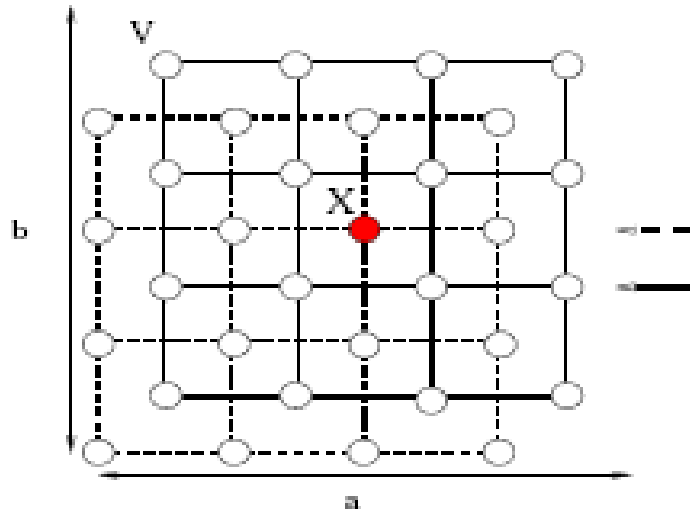
Modélisation de la structure électronique amas atomiques



Conclusions:

1. Même ordre magnétique avec et sans H
2. H dans les régions riches en vanadium (plan de vanadium)
3. a - dist. Fe-V ↗ b- μ_{Fe} ↗ et μ_{V} ↘ ou =

Modélisation de la structure électronique



Conclusions:

1- ↗ du volume disponible pour l'insertion pour les éléments à gauche de V (Ca, Sc, Ti)
 ↘ du volume disponible à droite de V (Cr, Mn, Fe)

2- déformation structurale d'une portée de 5Å (Ti-Cr-Mn-Fe)

3- Existence d'un état lié
 Position en énergie fonction de l'atome en substitution.

4- H en position T2 sauf pour X=Fe, Mn où H en position O1

5- $D(EF)$ ↗ pour H en T2
 $D(EF)$ ↘ pour H en O1

Conclusions

Adéquation de la puissance de calcul aux problèmes rencontrés

147 atomes

