



ALMACENAMIENTO DE HIDRÓGENO EN FASES DE LAVES

Ariana M. Robina Merlino^{(1,2)*}, Estela Pronsato⁽²⁾

⁽¹⁾Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de la Patagonia San Juan Bosco, Ciudad Universitaria Km. 4, 9005, Comodoro Rivadavia, Chubut, Argentina.

⁽²⁾Departamento de Física & IFISUR, Universidad Nacional del Sur, Av. Alem 1253, 8000 Bahía Blanca, Buenos Aires, Argentina.

*Correo Electrónico (autor de contacto): arrob@ing.unp.edu.ar

RESUMEN

Frente a la anunciada crisis energética, el hidrógeno se impone como un medio apto para convertir, almacenar y transportar energía. A pesar de que se caracteriza por tener la máxima energía específica, también presenta algunos inconvenientes relacionados con su baja densidad como gas diatómico en CNPT. No obstante puede ser almacenado de diversas maneras, los materiales en estado sólido constituyen una de las opciones más interesantes y desafiantes. De hecho, existe un gran número de compuestos intermetálicos de composición AB_2 , reconocidos por su asombrosa capacidad para almacenar hidrógeno. Estas aleaciones, comúnmente distinguidas como fases de Laves, cristalizan en tres estructuras distintas, bajo las siguientes formas representativas: cúbica $MgCu_2$ (C15) y hexagonales $MgZn_2$ (C14) y $MgNi_2$ (C36) [1]. Todas estas fases exhiben un arreglo atómico tan particular que los intersticios que se conforman en la red cristalina son todos tetraédricos y de variada regularidad. Precisamente estas pequeñas cavidades actúan como refugios para liberar y re absorber átomos de hidrógeno con demandas de energía relativas en ambos procesos, tal como una esponja absorbe y desorbe gotas de agua a través de sus poros.

En el presente trabajo se estudian las aleaciones $C14 Zr_{0.9}Ti_{0.1}(Ni_{0.5}Cr_{0.5-x}V_x)_2$ ($x=0, 0.25, 0.5$) por medio del programa Vienna Ab initio Simulation Package (VASP) [2], fundamentado en la Teoría del Funcional de la Densidad, a los fines de conocer la capacidad de almacenamiento de hidrógeno de las tres fases, hallar los sitios intersticiales más favorables energéticamente para la absorción de átomos de hidrógeno y describir el estado de cargas de los sistemas según diversos entornos químicos; en vistas a comparar, finalmente, con los valores determinados para el compuesto $C14 Zr(Cr_{0.5}Ni_{0.5})_2$ [3]. Se estima que el reemplazo parcial de Ti y V en este tipo de aleaciones mejoraría la capacidad de almacenamiento de hidrógeno y el desempeño electroquímico.

ABSTRACT

Hydrogen seems to be the ideal means of energy storage for transportation and conversion of energy in a comprehensive clean-energy concept, on account of the announced global energy crisis. Even though it has the highest specific energy, hydrogen also presents some drawbacks related to its very low density as diatomic gas in NTP. Although it can be stored in different ways, solid state materials, such as metal hydrides, is perhaps the most interesting and challenging option. In fact, there is a large number of intermetallic compounds with the ideal composition AB_2 that are known for its promising behaviour as solid state hydrogen storage materials. These alloys, commonly named as Laves phases, crystallize in three different crystal structures under the representative forms: cubic $MgCu_2$ (C15) and hexagonal $MgZn_2$ (C14) and $MgNi_2$ (C36) [1]. All these phases belong to a group of lattice types in which all interstices are formed by tetrahedra of variable regularity. In essence, these very small holes in the atomic arrangement of these materials would ideally act as refuges for hydrogen atoms, releasing and reabsorbing them with little inducement for either process, just as a sponge have pores that absorb and desorb drops of water.

In this work, C14 $Zr_{0.9}Ti_{0.1}(Ni_{0.5}Cr_{0.5-x}V_x)_2$ ($x=0, 0.25, 0.5$) structures are studied by density functional theory calculations employing the Vienna Ab initio Simulation Package (VASP) [2] in order to determine its hydrogen absorption capacities, find the energetically most favorable locations for hydrogen atoms and describe the charge state of the systems due to different chemical environments; to finally compare results with the C14 $Zr(Cr_{0.5}Ni_{0.5})_2$ compound [3]. The partial replacement of Ti and V elements in these alloys could improve the hydrogen storage capacities and electrochemical performances.

REFERENCIAS

1. D. Shoemaker and C. Shoemaker, "Concerning atomic sizes and capacities for hydrogen absorption in the AB_2 Friauf-Laves phases"; Journal of the Less-Common Metal, Vol. 68 (1979), p. 43-58.
2. G. Kresse and J. Furthmüller, "Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set"; Computational Materials Science. Vol. 6 (1996), p. 15-50.
3. A. Robina Merlino, R. Luna, A. Juan, and E. Pronso, "A DFT study of hydrogen storage in $Zr(Cr_{0.5}Ni_{0.5})_2$ Laves Phases"; International Journal of Hydrogen Energy. Vol. 41 (2016), p. 2700-2710.

TÓPICO DEL CONGRESO O SIMPOSIO: *T18*

PRESENTACIÓN (ORAL O PÓSTER): *P (poster)*