

## ***Własności elektronowe związków międzymetalicznych zawierających wodór: obliczenia z pierwszych zasad.***

**Miejsce realizacji:** Zakład Teorii Ciała Stałego, Instytut Fizyki Molekularnej PAN  
<http://www.ifmpan.poznan.pl/scientificd.php?div=2>

**Kontakt:** Opiekun: dr hab. Andrzej Szajek, prof. nadzw. IFM PAN, tel.: 61 8695 124,  
e-mail: [Andrzej.Szajek@ifmpan.poznan.pl](mailto:Andrzej.Szajek@ifmpan.poznan.pl)  
Opiekun pomocniczy: dr inż. Mirosław Werwiński, tel.: 61 8695 125,  
e-mail: [Werwinski@ifmpan.poznan.pl](mailto:Werwinski@ifmpan.poznan.pl), <http://www.ifmpan.poznan.pl/~wemir/>

### **Wprowadzenie:**

Ze względu na coraz wyższe ceny paliw, a także w celu uniezależnienia się od krajów posiadających surowce mineralne, głównie Rosji oraz Krajów Bliskiego Wschodu, Unia Europejska oraz Stany Zjednoczone przykładają coraz większą wagę do rozwoju badań nad innymi, alternatywnymi źródłami paliw, w tym również tych wykorzystywanych w przemyśle transportowym (samochodowym). Jednym z takich paliw jest wodór. Większość instalacji przemysłowych produkujących wodór jest od razu połączona z instalacjami do wykorzystania wodoru, ponieważ istnieje duży problem z jego przechowywaniem i transportem. Problem ten gra kluczową rolę w zastosowaniu wodoru jako paliwa samochodowego. Jednym ze sposobów magazynowania wodoru jest przechowywanie go w postaci związków chemicznych takich jak  $\text{CaH}_2$ ,  $\text{KH}$ ,  $\text{LiH}$ ,  $\text{NaH}$ ,  $\text{LiBH}_4$ ,  $\text{NaBH}_4$ . Do określenia własności elektronowych badanych związków użyte zostaną metody obliczeń struktury pasmowej typu *ab-initio*. Obliczenia tego typu w Zakładzie Teorii Ciała Stałego IFM PAN wykonywane są od ponad dwudziestu lat, efektem jest ponad 250 publikacji. Baza używanych kodów jest bardzo szeroka, wykorzystywane są kody, które potrafią zrównoleglić obliczenia na serwerach wieloprocesorowych o dwóch, czterech, a niedługo ośmiu rdzeniach na procesor (<http://www.ifmpan.poznan.pl/scientificd.php?div=2&p=2>)

Metody *ab-initio* pozwalają określić strukturę elektronową materiałów wyjściowych oraz zawierających wodór, stwierdzić czy dana struktura jest stabilna, a tym samym czy istnieje możliwość zsyntetyzowania danego układu. Można również modyfikować domieszkami matrycę, w której lokują się atomy wodoru.

### **Cel naukowy pracy i proponowane metody badawcze.**

Celem będzie znalezienie stabilnych związków o potencjalnie największych możliwościach magazynowania wodoru, określenie ich własności elektronowych oraz ich modyfikacja różnymi domieszkami w celu poprawy ich stabilności.