

First-principle calculation of MgH₂ and LiH for hydrogen storage

Y. Bouhadda, A. Rabehi and S. Bezzari-Tahar-Chaouche

Unité de Recherche Appliquée en Energies Renouvelables,
B.P. 88, Garet Etaam, 47000 Ghardaïa

Abstract –

First-principles calculation has been performed on the simple hydrides LiH and MgH₂ using the full-potential linearized augmented waves (FP-LAPW). The electronic structure and structural stability are studied. The formation energy has been investigated on these promising candidates for hydrogen storage applications. Our calculated results generally are in good agreement with experimental data. The differences were discussed in this paper.

Résumé –

Dans ce travail, nous avons étudié deux simples hydrures LiH et MgH₂ par le calcul du premier principe en utilisant la méthode de linéarisation LAPW. Les structures électroniques et cristallines d'équilibre ont été étudiées, ainsi que l'énergie de formation de ces deux hydrures prometteuses dans les applications de stockage solide d'hydrogène. Nos résultats du calcul sont confrontés aux données expérimentales.

Keywords:

Hydrides – FP-LAPW - Formation energy – Hydrogen storage.