

Electronic properties of Zintl phase hydride for hydrogen storage

K. Khodja and Y. Bouhadda

Unité de Recherche Appliquée en Energies Renouvelables, URAER
Centre de Développement des Energies Renouvelables, CDER
47378, Ghardaïa, Algeria

Abstract –

In this paper we report the SrAl₂H₂ electronic properties which is a Zintl phase hydride in frame of the Density Functional Theory ‘DFT’ using the plane wave and pseudo potential method. We discuss the chemical bond nature using total and partial density of states ‘DOS and PDOS’, also we calculated the bonding distance of hydride compound and its precursor SrAl₂ and the enthalpy formation of the SrAl₂H₂ for hydrogen storage.

Résumé –

Dans ce travail, nous avons étudié les propriétés électroniques du SrAl₂H₂ qui est un composé hydride de phase Zintl dans le cadre de la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT) en utilisant la méthode des ondes planes et du pseudo potentiel. Grâce à la densité d’état totale et partielle ‘DOS et PDOS’, nous avons pu discuter la nature des liaisons chimiques. Nous avons aussi calculé les distances des liaisons du composé hydride et de son prédécesseur le SrAl₂ et son enthalpie de formation pour une application dans le domaine du stockage de l’hydrogène.

Keywords:

Hydrogen Storage - Zintl Phase - Metal Hydride - Electronic Properties - Density Functional Theory.