

## Streszczenie

Metaliczne nanomateriały odwracalnie absorbujące wodór stanowią grupę układów, która cieszy się ogromnym zainteresowaniem naukowców na całym świecie. Wynika to z rosnącego zainteresowania wodorem jako nośnikiem energii, m.in. z powodu ograniczonych zasobów paliw kopalnych oraz negatywnych dla środowiska skutków ich spalania. Wodór jest pierwiastkiem charakteryzującym się około trzykrotnie wyższą energią spalania niż obecnie stosowane paliwa. Wodór pobierany z bezpiecznego magazynu, jakim może być metaliczny nanomateriał, i transportowany do silnika wodorowego lub ogniwa paliwowego, może zasilać pojazdy i małe elektrownie. Metody wykorzystujące wodór są czyste i bezpieczne, gdyż jedynym produktem ubocznym jego spalania lub przetwarzania na energię elektryczną jest woda.

Metaliczne nanomateriały odwracalnie absorbujące wodór znajdują również zastosowanie w wielu innych aplikacjach, m.in. jako magazyny energii cieplnej, jako ujemne elektrody w ekologicznych akumulatorach typu Ni-MH, czy nowoczesne sensory i półprzepuszczalne okna na bazie wodorku itru. W miarę jak rozwijają się badania nad wodorkami metali, w dużej mierze motywowane celem zwiększenia pojemności przechowywanego w nich wodoru, pojawiają się nowe, coraz bardziej zaawansowane ich zastosowania.

Prezentowana rozprawa doktorska ma charakter poznawczy i jej głównym założeniem jest poszerzenie stanu wiedzy na temat metalicznych nanomateriałów stopowych mających zastosowanie jako magazyny wodoru. Praca dostarcza nowych wyników badań struktury elektronowej wybranych cienkich warstw związków międzymetalicznych metali przejściowych i lantanowców odwracalnie absorbujących wodór. Co więcej, daje ona wgląd w to jak domieszkowanie i nanostruktura wpływają na wspomniane właściwości [1]. Ponadto, praca opisuje wpływ wodorowania na magnetyczne sprzężenie wymienne w warstwach potrójnych Fe/V/Fe.

Otrzymane wyniki mogą być wykorzystane do uzyskania nowych nanomateriałów metalicznych, charakteryzujących się zwiększoną absorpcją wodoru i lepszymi właściwościami wodorowania. Uzyskane wyniki eksperymentalne, poparte obliczeniami teoretycznymi wykorzystującymi metody *ab initio*, mogą być przydatne przy udoskonalaniu już istniejących nanomateriałów do przechowywania wodoru.

Zgodnie z pół-empirycznym modelem Miedemy – Griessena [2], entalpia tworzenia wodoru metalu oraz jego stabilność zależą między innymi od szerokości pasma walencyjnego matrycy metalicznej. Dlatego też, głównym celem pracy było zbadanie pasm walencyjnych wybranych nanokrystalicznych cienkich warstw stopowych o wysokiej czystości. Nanokrystaliczne cienkie warstwy stopowe La-Co, La-Ni,  $\text{LaNi}_4\text{M}$  ( $\text{M} = \text{Al}, \text{Co}$ ), a także Fe-Ni-Ti i  $\text{ZrPd}_2$  były badane ze względu na ich właściwości elektronowe w nawiązaniu do pół-empirycznego modelu wodorowania [2]. Motywacją do przeprowadzenia tych badań były m.in. ostatnie doniesienia dotyczące własności litych materiałów nanokrystalicznych typu  $\text{LaNi}_5$  [3]. Poza tym, możliwość potencjalnego zastosowania związków typu  $\text{ZrPd}_2$  jako membran do separacji wodoru, charakteryzujących się jego wysoką przenikalnością [177]. Przy pomocy magnetronowego rozpylania katodowego, otrzymano nano- oraz polikrystaliczne cienkie warstwy, które zostały zbadane *in situ* metodą XPS. Otrzymane wyniki eksperymentalne wykazują dobrą zgodność z rezultatami obliczeń teoretycznych *ab initio*.

Ponadto, za pomocą magnetronowego rozpylania katodowego otrzymano cienkie warstwy potrójne Fe/V/Fe. Prace te były inspirowane doniesieniami o wytworzonych ostatnio układach modelowych typu supersieć V/Fe i modyfikacji ich magnetycznego międzywarstwowego sprzężenia wymiennego (IEC) poprzez wanad [4,5]. Właściwości magnetyczne otrzymanych trójwarstw zostały scharakteryzowane za pomocą magnetometru wibracyjnego. W trójwarstwach Fe/V/Fe zbadano wpływ wodorowania na siłę magnetycznego sprzężenia wymiennego poprzez wanad.

Reasumując, celem niniejszej rozprawy doktorskiej było zbadanie korelacji pomiędzy strukturą a szerokością pasma walencyjnego metalicznych materiałów cienkowarstwowych odwracalnie absorbujących wodór oraz określenie wpływu wodorowania na magnetyczne sprzężenie wymienne w trójwarstwach Fe/V/Fe.