



ALMACENAMIENTO DE HIDRÓGENO EN CÚMULOS DE SILICIO DOPADOS

Alejandra Guadalupe Loreto-Rojas¹, Iran Fernando Hernandez-Ahuactzi¹, Gregorio Guzman-Ramirez¹,

¹Departamento de Ingenierías, Centro Universitario de Tonalá, Universidad de Guadalajara.
Av. Nuevo Periférico No.555 C.P. 48525; Tonalá Jalisco México.

alemiri-1689@hotmail.com

Actualmente el mayor reto que enfrenta la economía del hidrógeno es almacenarlo de una manera segura, barata y utilizarla en aplicaciones de transporte [1]. En algunos trabajos se ha intentado almacenar hidrógeno a través de sistemas órgano-metálicos [2]. En este trabajo estamos interesados en el almacenamiento de hidrógeno molecular a través de cúmulos de silicio usando litio como metal atractor.

Comenzamos buscando cúmulos estables de silicio desde 12 a 20 átomos. Se realizó un estudio de *bench-marking* con diferentes niveles de teoría para encontrar el nivel más adecuado que prediga de la mejor manera algunas propiedades con resultados experimentales disponibles en la literatura. Utilizamos en total 24 niveles de teoría dentro de la Teoría de funcionales de la Densidad [3]. El nivel de teoría más adecuado de acuerdo a éste estudio es: pbepbe/6-311+g(d).

Lo siguiente fue dopar el cúmulo con un átomo de un metal alcalino con el litio. Utilizamos el litio por varias razones, la primera es porque en estudios previos se ha encontrado que los metales alcalinos realizan una transferencia de carga hacia la especie que está siendo dopada con estos metales, también porque es un metal muy accesible computacionalmente hablando.

Se dopan los sistemas de silicio con un átomo de litio en diferentes puntos estratégicos en la superficie de cada uno de los cúmulos ya optimizados y se eligen las estructuras con la que la posición del litio involucraba la energía electrónica más baja de toda la molécula. A estas estructuras, se le agregaron hidrógenos moleculares cerca del átomo de litio. Se presenta una racionalización de los resultados obtenidos.

Referencias:

- [1]. J.R. Aries, Nuevos Métodos de almacenamiento de hidrógeno para su uso en vehículos de transporte, UCCUAM, (2005).
- [2] J. A. Alonso, Chem. Rev. 100, 637 (2000),
- [3] Hohenberg, P., Kohn, W., Phys. Rev. 136, B864, (1964).