

Almacenamiento de Hidrógeno en Nanopartículas Huecas de Paladio con Bordes de Grano

Jimena López^{*1}, Max Ramirez^{1,2}, Alejandro Varas^{1,2}, José Rogan^{1,2}, Felipe Valencia^{2,3}.

¹Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, Santiago

²Centro para el desarrollo de la Nanociencia y Nanotecnología (CEDENNA), Santiago.

³Departamento de Computación e Industrias, Facultad de Ciencias de la Ingeniería, Universidad Católica del Maule, Talca.

*jimena.lopez@ug.uchile.cl

Abstract

Debido a la tendencia del hidrógeno a posicionarse como un candidato para reemplazar a los combustibles fósiles, es necesario pensar en nuevas formas de transporte y almacenamiento que permitan satisfacer las cadenas de lógicas desde un punto de vista productivo e industrial. Por lo anterior, formas de almacenamiento como es el caso de almacenamiento en estado sólido o en hidruros metálicos a permitido alcanzar densidades de almacenamiento superiores con respecto a las técnicas convencionales[1]. Algunos trabajos teóricos y experimentales han mostrado que las nanoesferas metálicas de Níquel o Paladio presentado densidades de almacenamiento ultra altas en comparación con los respectivos materiales en estado bulto.[2,3] En este trabajo nos enfocaremos en el estudio de nanosferas de Pd con bordes de grano como un potencial candidato para mejorar el almacenamiento de Hidrogeno en este tipo de nanoestructuras. Por medio, de técnicas de montecarlo y Dinámica molecular se hidrogenaron nanoesferas de Pd con distinta densidad de borde de granos. Los resultados sugieren que el borde de grano actúa como un canal de migración para el hidrógeno, que permite mejorar la absorción para un potencial químico dado. Lo anterior sugiere que realizar ingeniería sobre los bordes de grano en nanoestructuras permite mejor el desempeño de estos materiales de cara a aplicaciones para el transporte y almacenamiento de hidrógeno.

Acknowledgement: This work was supported by the Fondo Nacional de Investigaciones Científicas y Tecnológicas (FONDECYT, Chile) under grants #1190662 (JR, MR, AV, FV), #11190484 (FV) y #3190123 (AP). The authors thanks to Financiamiento Basal para Centros Científicos y Tecnológicos de Excelencia AFB180001. Powered@NLHPC: this research was partially supported by the supercomputing infrastructure of the NLHPC (ECM-02).

References

- [1] Schneemann et. Al, Chemical Review, 118(22), 10775, 2018
- [2] Mehrizi, M., Abdi, J., Rezakazemi, M., Salehi, E., International Journal of Hydrogen Energy, 45, 35, 17583, 2020
- [3] Valencia et al., The journal of Physical Chemistry C, 120,41, 23836, 2016.