



# VII Encuentro Argentino de Materia Blanda

## Estudio de adsorción de H<sub>2</sub> sobre clusters de magnesio Mg<sub>n</sub> (n=1-6)

Gaztañaga Francisco<sup>1</sup>, Luna C. Romina<sup>1</sup>, Jasen Paula V.<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>Dpto. Física-Universidad Nacional del Sur-IFISUR-CONICET  
franciscogazta@gmail.com

Los hidruros metálicos, como el MgH<sub>2</sub>, LiH, CaH<sub>2</sub>, han sido ampliamente estudiados para su uso en almacenamiento de hidrógeno. Puntualmente, el MgH<sub>2</sub> ha tenido la atención de la comunidad científica debido a su alta capacidad de almacenamiento de hidrógeno (7.66% wt) y su excelente reversibilidad. Sin embargo, su alta temperatura de desorción y lenta cinética de adsorción/desorción, son un obstáculo para su aplicación práctica. Esta complicación podría ser resuelta a través de la nanoestructurización o la utilización de catalizadores [1].

En este trabajo preliminar se estudiaron las características geométricas y energéticas de pequeños clusters de Mg<sub>n</sub> (n = 1 – 6) y su capacidad de adsorción de H<sub>2</sub>. Dicho análisis se realizó en base a la teoría del funcional de la densidad (DFT) y utilizando el software VASP [2]. Inicialmente se optimizaron las geometrías de los clusters y luego se consideraron diferentes sitios de adsorción de H<sub>2</sub> sobre éstos (ver Figura 1).

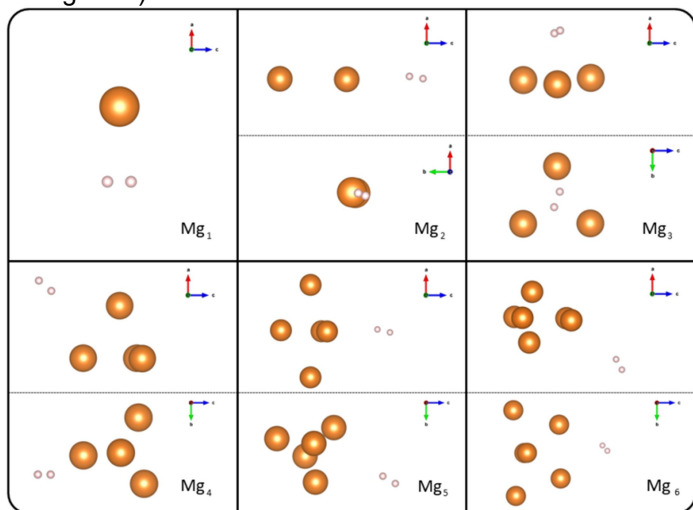


Figura 1. Adsorción de H<sub>2</sub> sobre Mg<sub>n</sub> (n=1- 6),

De los resultados obtenidos se vio que, independientemente del tamaño del cluster, la distancia H-H (0.75 Å) no se ve modificada luego de la adsorción. La adsorción de H<sub>2</sub> es energéticamente favorable excepto para el Mg atómico. Además, el Mg<sub>6</sub> expresó la energía de enlace más favorable, E<sub>B</sub> = 0.54 eV.

Se puede concluir que, si bien la adsorción de H<sub>2</sub> es favorable en algunos clusters, la energía de dicho enlace es muy débil y no alteró sensiblemente la distancia de enlace H-H. Una posible solución a este inconveniente podría ser soportar los cluster de Mg sobre algún material, buscando el debilitamiento del enlace H-H. Actualmente nos encontramos estudiando el efecto de nanotubos de carbono de pared simple, SWCNT (8,0), como catalizador.

### Referencias.

[1] Yartys, V. A. y otros, *International Journal of Hydrogen Energy*, **2019**, 44, 15, 7809-7859.

[2] <https://www.vasp.at>