

BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA
INSTITUTO DE FÍSICA
“Ing. Luis Rivera Terrazas”



SEMINARIO SEMANAL
“Jesús Reyes Corona”



“Adsorción De Hidrógeno Molecular Sobre Superficies Basadas En Grafeno”

Dr. Emmanuel Vallejo Castañeda

Escuela Superior de Apan, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo

El almacenamiento eficiente de hidrógeno molecular constituye un desafío relevante para el desarrollo de tecnologías energéticas sostenibles. En este trabajo se estudia, mediante dinámica molecular ab initio basada en DFT, la interacción de H_2 con una superficie de grafeno con cinco vacancias, empleando una supercelda periódica de 10×10 (C_{195}) a 300 K y correcciones de Van der Waals. La evolución del sistema se caracteriza mediante análisis de fluctuaciones multifractales sin tendencia (MF-DFA), identificándose la disociación de H_2 y su posterior adsorción química sobre la superficie, con una energía de adsorción superior a 1 eV y distancias H–H y H–C compatibles con la formación de enlaces químicos. Asimismo, las series temporales asociadas con la dinámica exhiben un comportamiento multifractal, evidenciado mediante el análisis del exponente generalizado de Hurst y del espectro multifractal. Finalmente, se emplea movimiento browniano fraccionario para predecir la evolución de la dinámica molecular, mostrando que la combinación de simulaciones atomísticas, análisis multifractal y modelos estocásticos constituye una estrategia potencial para caracterizar y predecir procesos de adsorción y contribuir al diseño de materiales basados en grafeno para el almacenamiento de hidrógeno.

Auditorio del Instituto
Viernes 11 de septiembre de 2026
13:00 hrs