



Seminario de Estudiantes 2017-B

Invita a la conferencia

Estudio del efecto de dopaje electrónico en la estabilidad de hidruros metálicos alcalinos

Presenta

Dra. Mónica Araceli Olea Amezcua

IFUAP-BUAP

RESUMEN

El almacenamiento de hidrógeno en estado sólido basado en hidruros metálicos ofrece diversos beneficios comparado con otros medios de almacenamiento (gas comprimido a altas presiones o gas licuado) debido a que estos hidruros son ligeros y contienen grandes densidades volumétricas de hidrógeno. Los hidruros metálicos proporcionan un modo de almacenamiento seguro y eficiente, donde la carga de hidrógeno se realiza por medio de la aplicación de presión. Desafortunadamente, estos sistemas presentan una gran estabilidad, lo cual afecta las propiedades cinéticas de deshidrogenación, necesitando de altas temperaturas. Varios esfuerzos se han realizado para poder mejorar las propiedades de deshidrogenación de los hidruros metálicos. Específicamente, la cinética y la temperatura de desorción se han mejorado por medio de la adición de catalizadores en los hidruros, la cual introduce defectos e impurezas difíciles de caracterizar. Otro método para obtener menores temperatura de deshidrogenación es dopar al hidruro con metales de transición como: Ti, V, Fe, Cu, Ni, Al, Mn, entre otros. Sin embargo, el mecanismo que causa este efecto aún no es completamente entendido y estos sistemas actualmente se encuentran lejos de cumplir con los requerimientos necesarios para su aplicación en la industria.

En el presente trabajo se propone realizar un estudio sistemático de los efectos del dopaje electrónico en la estabilidad de hidruros metálicos alcalinos. El dopaje se realizará con metales alcalino-térreos, formando los sistemas aleantes: $\text{Li}_{1-x}\text{BexH}$, $\text{Na}_{1-x}\text{MgxH}$ y $\text{K}_{1-x}\text{CaxH}$. El estudio se desarrollará empleando la teoría del funcional de la densidad (DFT) y la versión autoconsistente de la aproximación del cristal virtual (VCA) para modelar el dopaje. La evolución de las propiedades estructurales, electrónicas y vibracionales del estado base de las aleaciones se analizará en función de la concentración de los elementos dopantes. La dinámica de red de los respectivos sistemas será calculada por medio de la teoría de respuesta lineal (LRT) y la teoría perturbativa del funcional de la densidad (DFPT); los espectros de dispersión fonónicos serán estudiados poniendo especial atención en la estabilidad del cristal, así como la correlación con la estructura electrónica.

Fecha: **15 de Agosto de 2017**

Lugar: **Auditorio del IFUAP, Edificio IF1**

Horario: **16 hrs.**

- Contacto: seminario_estudiantes@ifuap.buap.mx
- www.ifuap.buap.mx/seminario/SeminarioEstudiantil.html