

Simulaciones de Montecarlo de adsorción de hidrógeno sobre superficies de níquel

Andrés R. Saravia¹, María Cecilia Giménez^{1,2,3}

¹*Universidad Nacional de Córdoba, Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación (FaMAF)*

²*Universidad Nacional de Córdoba, Instituto de Física Enrique Gaviola (IFEG)*

³*Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET)*

El hidrógeno verde es fundamental para la producción y almacenamiento de energía limpia y ofrece un camino para alejarse de los combustibles fósiles y la posibilidad de una economía energética más sustentable [1, 2]. La electrólisis del agua es ideal para la producción de hidrógeno a gran escala, ya que no produce ningún subproducto contaminante basado en carbono. Sin embargo, los electrocatalizadores que se requieren actualmente para la electrólisis del agua son metales nobles, lo que hace que esta opción potencial sea cara e inaccesible para aplicaciones industriales. Por lo tanto se hace necesario desarrollar electrocatalizadores abundantes en la tierra y de bajo costo. Una buena alternativa son los catalizadores basados en níquel, por su accesibilidad económica [3].

En este trabajo, simulamos, mediante el método de Montecarlo, la adsorción de átomos de hidrógeno sobre una red cuadrada que representa una superficie (001) de níquel. Para el cálculo de las energías de adsorción se tuvieron en cuenta todas las configuraciones posibles con primeros y segundos vecinos en los sitios de tipo “hollow”. Estas energías se calculan con DFT y luego se utilizan en el programa de Montecarlo.

Tomando diferentes temperaturas y variando el potencial químico, obtuvimos como resultado que, a partir de un cierto valor aproximado, el cubrimiento de átomos de hidrógeno sobre la superficie de níquel empieza a elevarse hasta alcanzar el cubrimiento completo. A bajas temperaturas, se observa un salto abrupto en las isothermas para un potencial químico alrededor de los -0.67eV , mientras que, a temperaturas más elevadas, las isothermas suavizan dicho salto.

Este comportamiento de las isothermas es esperable dado que, en base a los cálculos de DFT, las energías de adsorción disminuyen a medida que se consideran más átomos de hidrógeno. Esto indica que las interacciones netas son atractivas entre átomos adsorbidos. Incluso, los valores de las energías de adsorción se encuentran entre -0.64eV y -0.68eV , coincidiendo así con el punto aproximado de salto en el cubrimiento. Además de esto, los cálculos de energía arrojaron como resultado que los segundos vecinos tienen un peso incluso más importante con respecto a los primeros. Por ejemplo, una configuración con sólo cuatro primeros vecinos tiene un valor de -0.6659eV , mientras que una con sólo los segundos vecinos cuenta con -0.6712eV .

- [1] H.J. Neef. *International overview of hydrogen and fuel cell research. Energy* 34 (2009) 327-333
- [2] P.P. Edwards, V.L. Kuznetsov, W.I.F. David, N.P. Brandon. *Hydrogen and fuel cells: Towards a sustainable energy future. Energy Policy* 36 (2008) 4356-4362
- [3] Z. Angeles-Olvera, A. Crespo-Yapur; O. Rodríguez, J.L. Cholula-Díaz, L.M. Martínez, M. Videá. *Nickel-Based Electrocatalysts for Water Electrolysis. Energies* 2022, 15, 1609.