



IER

Instituto de Energías
Renovables

SEMINARIO DE DIRECCIÓN

"HYDROGEN STORAGE IN TRANSITION-METAL CLUSTERS SUPPORTED ON GRAPHENE MONOVACANCIES"

Romeo de Coss es licenciado en Física por la Universidad Autónoma de Nuevo León, Maestro en Ciencias con la especialidad de Física del Estado Sólido en el Instituto de Física de la Universidad Autónoma de Puebla, Doctor en Ciencias en la especialidad de Física Teórica por el Departamento de Física del Cinvestav-Mérida. Ha realizado estancias en prestigiosos laboratorios y centros de investigación como: Los Alamos National Laboratory, International Centre for Theoretical Physics, Trieste, Italia; Naval Research Laboratory, Washington D.C., USA; Università di Roma "La Sapienza", Roma, Italia; Institut für Festkörperphysik, Forschungszentrum Karlsruhe, Alemania; entre otros. El Dr. de Coss, actualmente es Profesor Titular del Departamento de Física Aplicada del Cinvestav-Mérida, donde realiza investigación básica y aplicada, y es miembro del Sistema Nacional de Investigadores nivel III. Es presidente de la Sección Sureste de la Academia Mexicana de Ciencias y Presidente de la Federación Latinoamericana de sociedades de Física. El área de investigación del Dr. de Coss es la Física de la Materia Condensada y el Estado Sólido, con más de 20 años de experiencia en cálculos de estructura electrónica de materiales, así como en el estudio de las propiedades vibracionales y la interacción electrón-fonón en superconductores.

In this talk, a detailed description of the atomic structure and the energetics of H₂ adsorption on Pd₄, Ni₄, and Ti₄ clusters supported on graphene monovacancies is presented. The large binding energy of that clusters on vacancies is a result of strong hybridization between the unsaturated carbon and the metal atoms, and it furthermore indicates that anchoring avoids migration of metal clusters on the graphene surface. We found that the binding energy of a single H₂ is strongly dependent on the specific cluster. In particular, the H₂ bond cleavage is favored by titanium clusters indicating the formation of metal hydrides. On the other hand, the Ni and Pd clusters favours the formation of Kubas complexes. The analysis of the absorption energies and H₂ average bond lengths suggests that supported Ti₄ cluster is a potential hydrogen storage candidate, being able to hold up to six H₂ molecules covalently with moderate average binding energy within the optimal range for an efficient cyclic adsorption/desorption process at room temperature and moderate pressures. Finally, the present theoretical results are discussed in the light of very recent experimental reports on hydrogen adsorption and desorption measurements in titanium-decorated graphene samples.

Dr. Romeo de Coss Gómez
Investigador Titular
CINVESTAV-IPN Unidad Mérida

ier.unam.mx

 /InstitutoDeEnergiasRenovables

 @ierunam

Viernes 19 de mayo de 2017, 12:00 hrs

Auditorio Tonatíuh, Instituto de Energías Renovables, UNAM
Priv. Xochicalco s/n, col. Centro, 62580 Temixco, Morelos