

ADSORCIÓN SOBRE UNA SUPERFICIE DE B₂FeTiFe (111) Y ESTUDIO DE LA INFLUENCIA DE Pt PRE-ADSORBIDO

V. Verdinelli^a, E. Germán^b, P. Jasen^b, E. Gonzalez^b, A. Juan^b, **J.M. Marchetti**^{b,c}

^a *Departamento de Química, Universidad Nacional del Sur, INQUISUR-CONICET
Av. Alem 1253 (8000) Bahía Blanca, Argentina.*

^b *Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur & IFISUR (UNS-CONICET)
Av. Alem 1253 (8000) Bahía Blanca, Argentina.*

^c *Department of Mathematical Science and Technology, Norwegian University of Life Sciences, Drøbakveien 31, Ås, 1432, Norway
jmarchetti@uns.edu.ar*

ABSTRACT

Debido al decaimiento de las reservas de petróleo y el incremento en el consumo, hidrógeno, como vector energético, juega un rol principal en nuestra sociedad para un futuro energéticamente más sostenible. Sin embargo, uno de los desafíos más importantes consiste en desarrollar una tecnología que permita almacenar hidrógeno de forma eficiente, barata y reversible.

Dentro de las aleaciones intermetálicas del tipo AB, la aleación de FeTi se presenta como una de las candidatas más prometedoras para almacenar hidrógeno, debido a su bajo costo, sus propiedades de reversibilidad y su capacidad de almacenamiento de 1,9 wt%.

En este trabajo, una superficie B₂-FeTiFe fue empleada para estudiar las interacciones de diferentes cantidades de platino y/o hidrógeno. Estudios sobre el efecto de 2, 3 y una monocapa de platino fueron realizados. Para cada uno de estos escenarios, la adsorción de hidrógeno fue estudiada. La ubicación de mínima energía tanto para el platino como para el hidrógeno fue determinada. Estudios sobre la densidad de estados (DOS) y sobre las propiedades de los enlaces entre la superficie y los adsorbatos fueron realizados