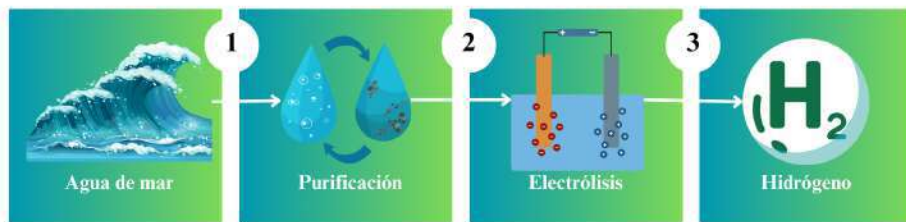


Estudio computacional mediante la Teoría del Funcional de la Densidad de catalizadores tipo Óxidos metálicos para aumentar la producción electrolítica de Hidrógeno verde

INTRODUCCIÓN

La electrólisis de agua de mar (ver pasos para la producción en el esquema 1) para producir hidrógeno verde implica desafíos técnicos y costos elevados debido a la necesidad de pretatamientos del agua para eliminar ciertas impurezas que aceleran la rata de corrosión del electrolizador.

Para disminuir los altos costos por el pretratamiento, se está investigando el desarrollo de nuevos catalizadores que sean más eficientes, resistentes a la corrosión y capaces de operar directamente con agua de mar, reduciendo así los costos y mejorando la viabilidad del proceso.



Esquema 1. Producción de hidrógeno verde a partir de la electrólisis de agua de mar

Se estudia el comportamiento energético de catalizadores metálicos investigados, para luego proponer derivados basados en Óxido de Iridio (IrO_2), Diseleniuro de molibdeno (MoSe_2), Óxido de Níquel (NiO) y Fosfuro de Cobalto (CoP), optimizándolos mediante simulación computacional para mejorar su actividad y eficiencia.

METODOLOGÍA

Se realizarán cálculos de DFT para obtener información detallada sobre las propiedades electrónicas y energéticas de los materiales catalíticos, utilizando el software Gaussian 16 (Ver figura 1).

Se evaluará el impacto de nuevos catalizadores Disulfuro de iridio (IrS_2), Diseleniuro de iridio (IrSe_2), Ditelururo de iridio (IrTe_2) y Dióxido de rodio (RhO_2) en la estabilidad estructural y en la redistribución de la carga electrónica, así como en la modificación de los niveles de energía para mejorar la actividad catalítica en HER (Reacción de Desprendimiento de Hidrógeno).

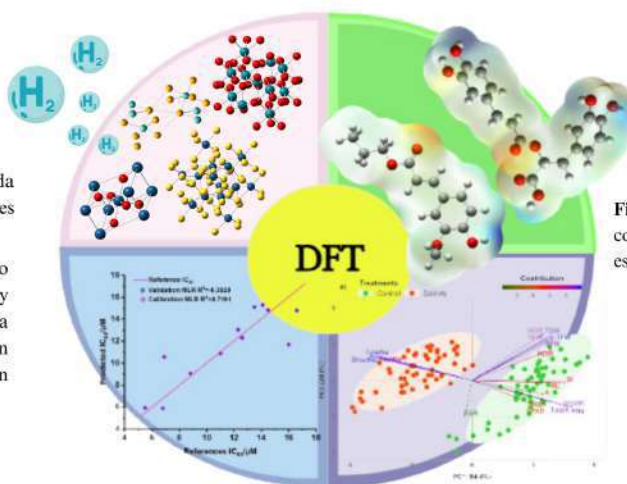


Figura 1. Metodología computacional empleada en este estudio.

RESULTADOS

La tabla 1 presenta una comparación entre catalizadores comerciales (IrO_2 , MoSe_2 , NiO y CoP) y los propuestos (IrS_2 , IrSe_2 , IrTe_2 y RhO_2) en términos de rendimiento teórico y energía del sistema.

TABLA 1. Valores energéticos (Hartree) y eficiencia (%) de los catalizadores comerciales Vs los catalizadores propuestos

Molécula	IrO_2	MoSe_2	NiO	CoP	IrS_2	IrSe_2	IrTe_2	RhO_2
Rendimiento teórico	90%	75-80%	85%	80-85%	76-88%	78-82%	70%	79-86%
Energía del sistema	-1393.172	-515.98	-6167.53	-2424.41	-1383.172	-600.21	-1273.112	-2320.21
Imagen								

Los catalizadores comerciales muestran una alta eficiencia en general, destacándose IrO_2 y NiO con un rendimiento del 90% y 85%, respectivamente. Por otro lado, los catalizadores propuestos tienen un rendimiento competitivo, con IrS_2 alcanzando un rango de 76-88% y RhO_2 con un rango de 79-86%, comparable a los comerciales.

CONCLUSIONES

En conclusión, los catalizadores propuestos muestran un rendimiento teórico y una estabilidad energética competitivos en comparación con los catalizadores comerciales. Estos resultados resaltan el potencial de los nuevos catalizadores como alternativas viables en aplicaciones orientadas a la producción de hidrógeno verde

Joaquín Hernández Fernández,¹ María Cecilia Ruiz Cardona,² Carolina Diosa Rosas,³ Nicolas Gomez Gonzalez,² Ivette Johana Nevito Paez² y Katherine Ortiz P.¹

¹Programa de Química, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Cartagena 130015, Colombia

²Vicepresidencia técnica de la agencia nacional de hidrocarburos, Bogota-colombia