Almacenamiento de hidrógeno en nanocavidades: papel de las diferentes fuerzas de adsorción

J. Roque[1], B. Zamora[1] y E. Reguera[1,2]

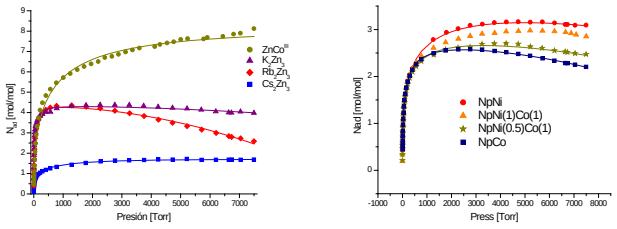
[1]*Centro de Investigación en Ciencia Aplicada y Tecnología Avanzada, Unidad Legaria, del Instituto Politécnico Nacional Legaria 694. Colonia Irrigación, 11500 México D. F.*
[2]*Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales, Universidad de La Habana, Cuba*

Resumen
El potencial de adsorción de la molécula de H_2 en nanocavidades depende tanto de las propiedades físicas de dicha molécula como de la superficie del material adsorbente. En este caso intervienen cinco interacciones diferentes: 1) interacción entre el momento cuadrupolar con el gradiente de campo eléctrico local, 2) polarización de la nube electrónica por un centro de carga, 3) fuerzas dispersivas (van der Waals), 4) momento cuadrupolar con el momento cuadrupolar de las moléculas de H_2 más cercanas y 5) la coordinación del H_2 con un centro metálico [1]. Este proyecto de tesis trata sobre la importancia relativa de estas cinco interacciones para el almacenamiento de hidrógeno en nanocavidades.

Introducción
El uso del hidrógeno como combustible constituye la opción más promisoria para aplicaciones móviles como el transporte automotriz. Su combustión limpia (como resultado se genera agua) posee un elevado valor calórico, 572kJ/mol, aproximadamente tres veces el de las gasolinas. Sin embargo, el H_2 molecular tiene una temperatura crítica muy baja (32.97K), esto impide su licuefacción por encima de dicha temperatura (independientemente de la presión que se ejerza sobre el). El proceso de licuefacción consume aproximadamente el 40% de la energía que sería generada. Además, el gradiente de temperatura con respecto del ambiente, implica pérdidas por evaporación. El almacenamiento de H_2 a altas presiones resulta poco práctico, al menos para aplicaciones móviles. Para una presión de 345 bar se alcanza una densidad de 15g/L, mientras que en su estado líquido posee 70 g/L [1,2]. Mediante estudios recientes, se sugiere la posibilidad de alcanzar valores de densidad cercanos al estado líquido, almacenando el H_2 en nanocavidades [1,2,4,5].

Procedimiento Experimental
El objeto de estudio son varias familias de sólidos con superficie extendida (laminares y/o nanoporosos), para el almacenamiento de H_2, entre ellos se pueden mencionar los cianometalatos, enrejado metal-orgánicos MOFs (por sus siglas en inglés), entre otros. Dicho estudio se desarrolla con el apoyo de las técnicas clásicas de caracterización de materiales: termogravimetría (Termobalanza de alta resolución TA Instruments 2950), difracción de rayos-X (difractómetro de rayos-X, Bruker D8 Advanced), análisis I-R (espetrómetro FT, Spectrum One de la Perkin Elmer) y la adsorción de H_2 (adsortómetro modelo ASAP 2050/2020 de la Micromeritics).

Resultados y Análisis
La figura 1 muestra los resultados experimentales y ajustes[3] de la adsorción de H_2 (hasta 7500Torr) en (a) $Zn_3T_2[Fe(CN)_6]_2$ donde T=K,Rb,Cs en comparación con el $Zn_3[Co(CN)_6]_2$ por ser isoestructurales; en dichas isotermas supercríticas se manifiesta la fuerte interacción entre los compuestos de Fe y el H_2, mientras que con el compuesto de Co la interacción es más débil a bajas presiones. Esto se debe a que el Zn (en el Zn_3Co^{III}) tiene su esfera de coordinación completa y la interacción es básicamente de tipo dispersiva. El compuesto de Cs posee la menor cantidad adsorbida, debido a la débil interacción con la molécula de H_2 y el volumen disponible en la cavidad.



a) b)

Figura 1. Isotermas de adsorción de H_2 a 75K en (a) $Zn_3T_2[Fe(CN)_6]_2$,(T=K,Rb,Cs) y (b) $T[Fe(CN)_5NO]$,(T=Ni,Co) hasta 7500Torr (10 atmósferas).

Agradecimientos
Agradecemos al Programa Institucional de Formación de Investigadores (PIFI), Secretaría de Investigación y Posgrado (SIP), CONACYT y CICATA-LEG por su apoyo a este trabajo. Los autores agradecen la ayuda de la M. en T.A. C. P. Krap durante el inicio de este trabajo.

Referencias
[1] E. Reguera, *J.Hydrogen Energy*. 1-5 (2009).
[2] M. Ball, M. Wietschel. *J Hydrogen Energy*, 34,615-627(2009).
[3] Wei Zhou, Hai Wa, Michael R. Hartman and Taner Yildrim, *J Phys.Chem. C*,111,16131-10137(2007).
[4] C.P.Krap, J. Balmaseda, L.F. del Castillo, B. Zamora, and E. Reguera, *J. Energy Fuels.* 62:2955 (2009).
[5] L. Reguera, J. Balmaseda, L.F. del Castillo and E.Reguera, *J.Phys. Chem. C*,112,5589-5597 (2008).