



Almacenamiento de H₂ en análogos del azul de Prusia de cobre: Evidencia de coordinación del H₂ al átomo de cobre

C.P. Krap¹, J. Balmaseda², E. Reguera¹

¹ Centro de Investigación en Ciencia Aplicada y Tecnología Avanzada del Instituto Politécnico Nacional, Legaria 694. Colonia Irrigación, 11500 México D. F.

² Departamento de Polímeros, Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM, México, D.F. C.P. 04510

Resumen

La adsorción de H₂ en análogos de azul de Prusia muestra el mayor valor para el cobre, sugiriendo la posibilidad de que se establece una interacción directa entre el átomo de cobre y la molécula de hidrógeno. El enlace del Cu²⁺ al grupo CN de los cyanometalatos muestra un comportamiento único. Debido a su configuración electrónica del Cu y a que el grupo CN actúa como grupo donante, la configuración del Cu en la superficie del poro es cercana a Cu⁺[1]. La gran densidad electrónica resultante en el átomo de Cu favorece su interacción del orbital t_{2g} con el orbital σ* anti-enlazante de la molécula de H₂.

Introducción

En la actualidad se utilizan como fuente de energía derivados de combustibles fósiles, los cuales son altamente contaminantes y provienen de fuentes no renovables. Una alternativa al respecto es el uso de hidrógeno, cuya combustión produce H₂O. El objetivo establecido por DOE para el 2010 para almacenar H₂ es del 6 % en peso, para un proceso reversible [2]. Una opción atractiva a favor de tener un proceso reversible es el almacenamiento en adsorción física en materiales porosos.

Procedimiento Experimental

Las muestras estudiadas se prepararon mezclando soluciones acuosas 0.01M de hexacianometalato de potasio (Fe, Co, Ir, Pt) y sulfato de cobre. Así se obtuvo Cu₂[Fe(CN)₆], Cu[Pt(CN)₆] y Cu₃[T(CN)₆]₂ con T = Fe, Co, Ir. Se preparó una serie mixta Cu_{3-x}Mn_x[Co(CN)₆]₂ a partir de soluciones de Cu²⁺ y Mn²⁺ en proporciones atómicas 1:1, 1:2, 1:4 y 1:8. La naturaleza de los sólidos estudiados se realizó a partir de datos de DRX, EDS, IR y TG. Las isoterms de adsorción de H₂ se midieron en un ASAP 2020 de Micromeritics.

Resultados y Análisis

El potencial de adsorción de H₂ en análogos de azul de Prusia que contienen cobre muestra una dependencia en la cantidad de átomos de cobre que se encuentran en la superficie del poro (Fig. 1). El mayor valor para los calores de adsorción (ΔH_{ads}) se obtuvo cuando el H₂ interacciona solamente con átomos de Cu (Fig. 2). Los datos experimentales sugieren que la molécula de H₂ es estabilizada dentro de la cavidad a través de la formación de un enlace de coordinación con el átomo de Cu.

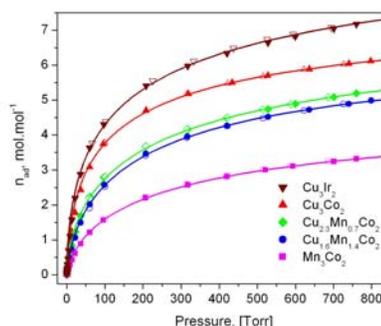


Figura 1. Isothermas de adsorción de H₂ a 75K en Cu_{3-x}Mn_x[Co(CN)₆]₂ y Cu₃[Ir(CN)₆]₂. Símbolo sólido: adsorción, símbolo abierto: desorción.

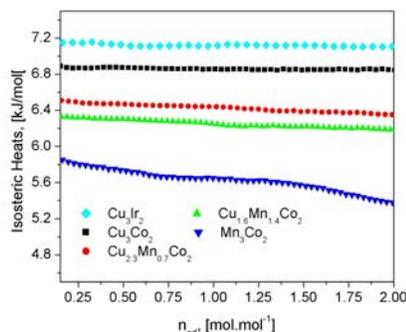


Figura 2. Calor de adsorción en Cu_{3-x}Mn_x[Co(CN)₆]₂ y Cu₃[Ir(CN)₆]₂.

Agradecimientos

Agradecemos al Programa Institucional de Formación de Investigadores (PIFI) el apoyo prestado para realizar este trabajo.

Referencias

- [1] Reguera E., et al. *Z Physik Chem*, **220** 1609 (2006)
- [2] <http://www.energy.gov/energysources/hydrogen.htm>

Nota: Estos resultados están en fase de publicación en *J. Phys. Chem. C* 112 (2008)