

Interacción del H₂ con centros metálicos localizados en la superficie de las cavidades en análogos del azul de Prusia

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

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, Universidad Nacional Autónoma Metropolitana, México D.F. C.P.04520.

Resumen

Los análogos de Prusia son sólidos porosos que nos permiten estudiar la interacción del H₂ con centros metálicos situados en la superficie de las cavidades. Los valores obtenidos para el calor de adsorción y el coeficiente osmótico sugieren que el átomo de Ni participa de una fuerte interacción de polarización con el H₂.

Introducción

El hidrógeno es un buen candidato para utilizarse como combustible ya que la oxidación del H₂ libera tres veces más energía que la gasolina pero el reto está en su almacenamiento, ya que a temperaturas ordinarias está en estado supercrítico ($T_c = 32.97\text{K}$). Una de las posibles formas de almacenamiento es por adsorción física en materiales porosos. Sin embargo, todavía no se cumple con la meta establecida por el Departamento de Energía de los E.U.A (9% en peso) [1], esto implica que se debe abundar en el estudio del potencial de adsorción del H₂.

Procedimiento Experimental

Las muestras estudiadas se prepararon por el método de precipitación con soluciones 0.01M de sulfatos de los metales involucrados y de hexacianocobaltato de potasio. Las series mixtas Ni_{3-x}Mn_x[Co(CN)₆]₂, Ni_{3-x}Co_x[Co(CN)₆]₂, Ni_{3-x}Cd_x[Co(CN)₆]₂ and Co_{3-x}Mn_x[Co(CN)₆]₂. Estas se lavaron 5 veces con agua destilada y el sólido se separó usando una centrifuga. Las isotermas de H₂ se midieron en un ASAP 2020 de Micromeritics a 75K y 85K. La data obtenida se analizo utilizando el método de Freundlich-Langmuir [2].

Resultados y Análisis

De acuerdo a la pendiente de la isoterma para la región de bajas presiones (Figura 1) la interacción entre huésped-hospedero sigue el siguiente orden Ni > Cu > Zn ~ Co ~ Cd > Mn. El orden de máxima capacidad de almacenamiento es, sin embargo, Cu > Zn > Ni > Co > Cd > Mn. Esta diferencia entre la interacción y la capacidad de almacenamiento se puede atribuir al grado de desorden de las vacancias dentro de la estructura. El Cu tiene una estructura cúbica Pm-3m donde las vacancias están más ordenadas y por lo tanto tiene un mayor volumen libre. La distribución de vacancias también determina la cantidad y la naturaleza de

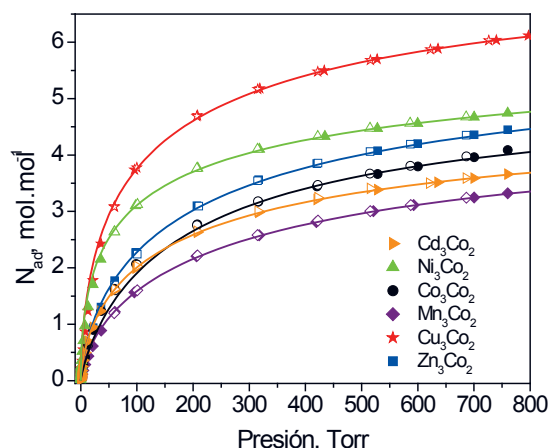


Figura 1. Isoterma de adsorción de H₂ a 77K para la serie T3[Co(CN)₆]₂. (Símbolos abiertos: desorción). los sitios metálicos disponibles para interactuar con el H₂ [3, 4].

Conclusiones

El átomo de Ni localizado en la superficie del poro mantiene un alto poder polarizante, lo que determina su fuerte interacción electroestática con la molécula de hidrógeno. El potencial de adsorción está determinado por las fuerzas de van der Waals y electroestática, exceptuando al Cu.

Agradecimientos

Agradecemos a los proyectos SEP-CONACyT 2007-61-541 and 82964, ICyTDF-PIFUTP08-158, al Programa Institucional de Formación de Investigadores (PIFI) y a la Secretaría de Investigación y Posgrado (SIP) por su apoyo a este trabajo.

Referencias

- [1] <http://www.energy.gov/energysources/hydrogen.htm>.
- [2] B. P. Bering, V. V. Serpinski, Izvestiya Akademii Nauk SSSR, Seriya Khimicheskaya, 1974, 11, 2427
- [3] R. Martinez-Garcia, M. Knobel, E. Reguera, J. Phys. Chem. B, 110 (2006) 7296
- [4] E. Reguera, H. Yee-Madeira, S. Demeshko, G. Eckold, J. Jimenez-Gallegos, Z. Phys. Chem. 223(2009) DOI 10.1524.zpch.2009.5455