



Adsorción de Metano en hexacianometalatos porosos

B. Zamora¹, J. Roque¹, J. Balmaseda², E. Reguera¹

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

²Instituto de Investigaciones en Materiales de la UNAM, Circuito Exterior s/n Ciudad Universitaria, 04510 México D.F.

Resumen

La adsorción de metano es posible a través de tres tipos de interacciones: 1) fuerzas dispersivas; 2) polarización de la nube electrónica debido a un centro de carga positiva; y 3) perturbación de la nube electrónica de la molécula debido a una interacción de polarización la cual induce un momento cuadrupolar. Este momento cuadrupolar inducido es capaz de interactuar con un gradiente de campo eléctrico local. En el presente trabajo, son discutidas las contribuciones de las interacciones dispersivas y electrostáticas de las fuerzas de adsorción a través de isothermas de metano en análogos del azul de Prusia y los hexacianometalatos de zinc tipo zeolita.

Introducción

El metano es el componente principal del gas natural. En su reacción de combustión produce 40% menos CO₂ que los combustibles utilizados actualmente, además de liberar una energía de 55.48 KJ/g similar al de la gasolina. Estas dos características y la gran disponibilidad a nivel mundial de depósitos de gas natural han estimulado su aplicación no sólo como soporte energético para los hogares y negocios, sino también en tecnología móvil. El desarrollo de materiales porosos para su almacenamiento ya ha logrado datos de interés en carbones activados y enrejados metal-orgánicos [1-3]. Los análogos del azul de Prusia y los hexacianometalatos tipo zeolita representan una familia ideal de sólidos porosos donde es posible obtener información de las contribuciones dispersivas y electrostáticas de las fuerzas de adsorción de la molécula de metano en estos materiales. En este estudio dos series de la familia de estos materiales porosos fueron evaluadas a través de isothermas de adsorción de metano: T₃[Co(CN)₆]₂ con T = Mn, Co, Ni, Cu, Zn, Cd; y Zn₃A₂[Fe(CN)₆]₂ con A = Na, K, Rb, Cs.

Procedimiento Experimental

Las isothermas de adsorción de metano fueron realizadas a 192 K usando un baño criogénico preparado con una mezcla de etanol-hielo seco en un adsortómetro ASAP 2020 marca Micromeritics. Las muestras utilizadas fueron previamente deshidratadas. Las isothermas de adsorción fueron ajustadas usando el modelo osmótico[4].

Resultados y Análisis

En la figura 1(a) es posible observar que la adsorción se debe principalmente a fuerzas dispersivas ya que el poder polarizante de los metales (Ni > Mn > Co > Cd > Cu) no coincide con las fuerzas de adsorción a bajas presiones. Tiene dos excepciones, el Cu tiene interacciones dispersivas

fuerzas por acumulación de densidad electrónica y el Zn cuenta con una esfera de coordinación completa lo que provoca que el metano tenga un difícil acceso al ambiente del metal. La figura 1(b) muestra el difícil acceso a la cavidad de la molécula de metano en los materiales de K y Na debido a su poder polarizante mayor. Con respecto a Rb y Cs, su poder polarizante menor permite el acceso de la molécula al poro, con un volumen de cavidad semejante y por tanto, una cantidad adsorbida similar.

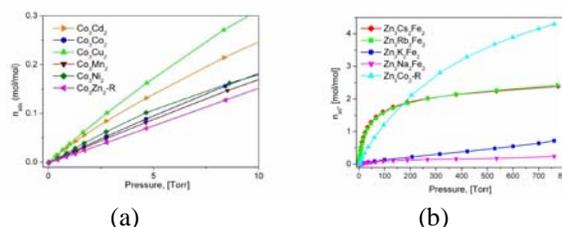


Figura 1. (a) Hexacianocobaltatos puros. La fuerza de interacción de adsorción es para Cu > Cd > Ni > Co > Mn > Zn ; (b) Serie de zinc tipo zeolita. Para A = Na y K, el enrejado poroso es inaccesible para la molécula de metano.

Conclusiones

El estudio en materiales porosos análogos del azul de Prusia nos indica que las fuerzas de adsorción de metano en ellos es principalmente debido a interacciones dispersivas. Con respecto a los hexacianometalatos tipo zeolita, la contribución de las fuerzas electrostáticas en la adsorción de metano no pueden ser ignoradas ya que pueden ser motivo suficiente para impedir la difusión del adsorbato a través del material adsorbente.

Agradecimientos

Esta investigación fue parcialmente apoyada por los proyectos SEP/CONACyT-2006-61541 y ICyTDF PIFUTP08-158. Los autores agradecen la ayuda de la M. en T.A. C. P. Krap durante el inicio de este trabajo.

Referencias

- [1] H. Wu, W. Zhou, T. Yildirim, J. Phys. Chem. C 113 (2009) 3029
- [2] H. Wu, W. Zhou, T. Yildirim, J. Am. Chem. Soc. 131 (2009) 4995
- [3] D. R. Lide, (Ed.) CRC Handbook of Chemistry and Physics, 84th Edition, 2003-2004, CRC Press, Fl., USA
- [4] B. P. Bering, V. V. Serpinski, Izvestiya Akademii Nauk SSSR, Seriya Khimicheskaya, 11 (1974) 2427