

Almacenamiento de hidrógeno en nanocavidades

E. Reguera

Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales, Universidad de La Habana, Cuba, y Centro de Investigación en Ciencia Aplicada y Tecnología Avanzada del IPN, Unidad Legaria, México; ereguera@yahoo.com

Recibido el 18/03/2009. Aprobado en versión final el 19/06/09.

Sumario. El hidrógeno, dado su alto calor de combustión, 572 kJ/mol, tres veces el de la gasolina, y a que el subproducto que genera (agua) es compatible con el medio ambiente, está siendo considerado como una alternativa a los derivados de combustibles fósiles, en particular, para aplicaciones en transporte automotor. La aplicación del hidrógeno en tecnologías móviles supone tres retos: la producción a partir de alguna fuente renovable como podría ser la disociación del agua; disponer de un método reversible, seguro y económicamente viable para su almacenamiento; e implementar su uso mediante celdas de combustible donde la energía química se transforma directamente en electricidad. El H_2 libre prácticamente no existe en la naturaleza; es por ello que hay que producirlo, no es una fuente primaria de energía como sí lo es el petróleo, sino un portador secundario. Su almacenamiento es, probablemente, el más difícil de esos retos debido a que el H_2 tiene muy baja temperatura crítica ($T_c = 32.97$ K) y a temperaturas ordinarias es un gas en estado supercrítico. La licuefacción del H_2 es posible cuando la fortaleza de las interacciones H_2 - H_2 (de tipo van der Waals y cuadrupolo-cuadrupolo) supera a la energía térmica (kT). Esto sugiere la posibilidad de lograr su almacenamiento a temperaturas por encima de T_c a través de una fuerte interacción H_2 -superficie en sólidos de elevada superficie específica, por ejemplo, en materiales laminares o nanoporosos. En esta contribución se evalúan las posibles interacciones H_2 -superficie que podrían estar presentes en este método de almacenamiento y su contribución relativa a la energía de adsorción del H_2 en materiales de superficie extendida. El alcance de esas interacciones se discute a partir de resultados experimentales acerca del almacenamiento de H_2 en nanocavidades. Asimismo, se evalúa el *estado del arte* y las perspectivas de este método de almacenamiento.

Abstract. Hydrogen, because of its large combustion heat, 572 kJ/mol, three times that of gasolines, and an environmentally compatible byproduct, water, is being considered as an alternative to fossil fuels derivatives; particularly in vehicular applications. The application of hydrogen as combustible in mobile technologies involves three challenges: the production from the water splitting, for instance; the availability of a reversible, safe and economically viable storage method; and its use through appropriate fuel cells where the chemical energy is directly transformed in electricity. Nature practically has no free H_2 . From this fact, H_2 must be produced. It is a secondary energy bearer, not a primary source like petroleum. The storage is probably the main of these challenges because H_2 has very low critical temperature ($T_c = 32.97$ K) and at ordinary temperatures it is supercritical gas. The H_2 liquefaction is possible when the strength for the H_2 - H_2 interactions (of van der Waals and quadrupole-quadrupole type) surpasses the thermal energy (kT). This suggests the possibility of be able the H_2 storage at temperatures above T_c through a strong H_2 -surface interaction in solids of extended surface, layered or nanoporous materials, for instance. In this contribution the possible H_2 -surface interactions that could be present in such storage method and their relative contributions to the H_2 adsorption energy in materials of extended surface are discussed. The role of these interactions is dicussed from experimental results on H_2 in nanocavities. The *state of art* and perspectives on this storage method are also evaluated.

Palabras clave. Assemblies of adsorbates 68.43.Hn; Kinetics of adsorption 68.43.Mn; Structure of porous materials 61.43.Gt