Almacenamiento de hidrógeno en materiales porosos: importancia de las diferentes fuerzas de adsorción.

J. Roque[1], A. Sainz[1] y E. Reguera[1,2]

[1]*Centro de Investigación en Ciencia Aplicada y Tecnología Avanzada del I.P.N., 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 de materiales porosos.

Introducción
El hidrógeno es considerado una alternativa a los derivados de los combustibles fósiles, en particular, para aplicaciones en transporte automotor y forma de almacenamiento de energía en aplicaciones estacionarias. Como resultado de su combustión se genera agua, posee un elevado valor calórico, 142kJ/g, aproximadamente tres veces el de las gasolinas (47.5 kJ/g). Sin embargo, la temperatura crítica (Tc) del H_2 molecular es muy baja (32.97K), por lo tanto es imposible licuarlo por encima de dicha temperatura (independientemente de la presión que se ejerza sobre él). El proceso de licuefacción (por debajo de Tc) consume aproximadamente el 40% de la energía que sería generada, lo cual es ineficiente. 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 (incluso superiores) al estado líquido, almacenando el H_2 en nanocavidades [1,2,4,5,6].

Procedimiento Experimental
Existen diferentes familias de sólidos porosos que se pueden catalogar como posibles candidatos para el almacenamiento de H_2. El objeto de estudio de este trabajo se centra en tres de ellas, los cianometalatos, los enrejados metal-orgánicos MOFs (por sus siglas en inglés) y las zeolitas. Dicho estudio se desarrolla con el apoyo de las técnicas clásicas de caracterización de materiales: termogravimetría (Termobalanza de alta resolución TA Instruments Q5000), difracción de rayos-X (difractómetro de rayos-X, Bruker D8 Advanced), análisis I-R (espectrómetro FT Spectrum One de la Perkin Elmer) y la adsorción de H_2 (adsortómetro modelo ASAP 2050/2020).

Resultados y Análisis
La figura 1 muestra las isotermas de la adsorción de H_2 en Mordenita sódica e intercambiadas con 50 y 60% de cobre respectivamente. En las isotermas de las zeolitas intercambiadas se manifiesta la fuerte interacción entre el H_2 y el Cu por la presencia de adsorción en ¨exceso¨, sin embargo, en la muestra con 60% Cu la cantidad adsorbida es menor, esto resulta de la competencia que existe entre la interacción del H_2 con dicho metal y el espacio disponible en las cavidades de la zeolita.

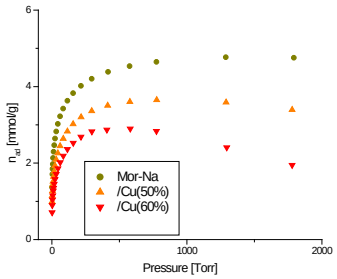

Figura 1. Isotermas de adsorción de H_2 a 75K en Mordenita sódica, e intercambiada con 50y 60% de Cu hasta 2000Torr (2.6 atmósferas).

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.

Referencias
[1] E. Reguera, *Int. J. Hydrogen Energy*, 34, 9163-9167 (**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**).
[6] Yun Liu, H. Kabbour, C. M. Brown, D. A. Neumann, and C. C. Ahn, *Langmuir*, 24, 4772-4777 (**2008**).

 ISBN: **978-607-414-180-1**