

Índice general

I. Contexto y Marco Teórico	9
1. Hidrógeno y almacenamiento.	11
1.1. Hidrógeno y energía.	11
1.1.1. Propiedades y ciclo del H_2 en la producción de energía.	11
1.2. Almacenamiento de hidrógeno (problemas y estrategias).	14
1.2.1. Almacenamiento Químico.	17
1.2.2. Almacenamiento Físico.	22
2. Caracterización de la adsorción de gases en sólidos microporosos.	37
2.1. Aproximación macroscópica	37
2.1.1. Composición	38
2.1.2. Propiedades estructurales.	39
2.1.3. Determinación de la capacidad máxima de adsorción.	41
2.1.4. Propiedades termodinámicas y cinéticas.	43
2.2. Aproximación Químico-Computacional	45
2.2.1. Métodos geométricos.	46
2.2.2. Cálculo de la energía de un sistema de partículas.	48
2.3. Fuerzas intermoleculares.	64
II. Resultados	69
3. Interacción $H_2 \cdots$ MOF-5 y capacidad de adsorción.	71
3.1. Metodología.	73
3.2. Resultados y discusión.	75
3.2.1. Optimización de la celda unidad del MOF-5.	75
3.2.2. Centros de adsorción de H_2 en el MOF-5.	76
3.2.3. Adsorción de varias moléculas de hidrógeno sobre el MOF-5.	78
3.2.4. Simetrías de Adsorción de H_2	84
3.2.5. Efecto de la distancia Zn – O en la Interacción $H_2 \cdots Zn$	85
3.2.6. Efectos de la Adsorción de H_2 en la Estructura Electrónica.	86
3.2.7. Adsorción a nivel MP2	89
3.3. Conclusiones.	90

Índice general

4. Saturación de centros de adsorción de H_2 y capacidades de adsorción.	93
4.1. Metodología	94
4.1.1. Modelos empleados para los cálculos	99
4.2. Resultados	101
4.2.1. Descripción químico-cuántica de la adsorción de H_2	101
4.3. Discusión	109
4.3.1. Análisis de la adsorción de H_2 en MOFs	109
4.4. Conclusiones	117
5. Efectos de confinamiento en la adsorción de hidrógeno en MOFs.	119
5.1. Metodología.	121
5.2. Resultados y Discusión	125
5.2.1. Campo de fuerza empleado	125
5.2.2. Adsorción de H_2 en microporos	133
5.3. Conclusiones	142
6. General Conclusions	145
III. Anexos	149
A. Anexo I Cálculo de isothermas de adsorción.	151
B. Anexo II Datos complementarios del Capítulo 4.	153
C. Anexo III Correcciones térmicas a la energía de interacción.	159
D. Anexo IV Índice de Tablas.	167
E. Anexo V Índice de Figuras.	173
F. Anexo VI Abreviaturas y acrónimos.	179
G. Publicaciones	183
H. Resumen	185