



ALMACENAMIENTO DE HIDRÓGENO EN NANOTUBOS DE CARBONO CERRADOS: UN ESTUDIO DFT

Ernesto López-Chávez^{1*}, Fray de Landa Castillo-Alvarado², Jaime Ortíz-López², Yésica A. Peña-Castañeda².

¹Programa de Ingeniería Molecular y Nuevos Materiales de la Universidad Autónoma de la Ciudad de México.
Av Fray Servando Teresa de Mier 92-110, Col. Centro Histórico, Delegación Cuauhtémoc, CP 06080,
México, D.F. Tel. 55-5134-9804 ext. 11110. Email: elopezc_h@hotmail.com

²Escuela Superior de Física y Matemáticas del Instituto Politécnico Nacional. Edificio 9 de la Unidad
Profesional Adolfo López Mateos, Col. Lindavista, Delegación Gustavo A. Madero, CP 07738, México, D.F.

RESUMEN

Las nanoestructuras de carbono, gracias a su baja masa y su alta capacidad de adsorción, ofrecen un gran potencial en el proceso de almacenamiento de hidrógeno. No obstante, diversos experimentos realizados con nanotubos de carbono han puesto de manifiesto ciertos problemas. Para empezar, el almacenamiento de hidrógeno en nanotubos de carbono es posible únicamente a temperaturas extremadamente bajas (inferiores a -196 grados centígrados). Además, cuando la muestra se deja a temperatura ambiente, se evapora la mayor parte del hidrógeno. En este trabajo, presentamos estudios teóricos DFT a través de modelamiento y simulación molecular para explicar cómo podrían usarse los nanotubos semicerrados de carbono o nanohorns para almacenar hidrógeno con más eficacia que en nanotubos simples. Se observa que la interacción entre el hidrógeno y los nanotubos semicerrados de carbono es mucho más intensa que entre aquél y los nanotubos de carbono. Los estudios indican que el hidrógeno interactúa con mucha más intensidad con tales nanoestructuras carbonosas que con los nanotubos de carbono, lo que indica que los nanotubos semicerrados y las nanoestructuras similares pueden ofrecer perspectivas mucho mejores como medios ligeros para el almacenamiento de hidrógeno.

Palabras clave: Nanotubos de carbono cerrados, almacenamiento de hidrógeno, simulación computacional