

# Índice general

|  |          |
|--|----------|
| Prefacio   | iii      |
| Agradecimientos  | iv       |
| Resumen  | x        |
| Abstract   | xii      |
| Objetivos y organización de la Tesis                             | xiv      |
| <b>1. Introducción general</b>                                   | <b>1</b> |
| 1.1. La interacción Metal-Hidrógeno.....                         | 1        |
| 1.1.1. Generalidades.....  | 1        |
| 1.1.2. Compuestos de interés para la absorción de Hidrógeno..... | 5        |
| 1.1.3. Algunas aplicaciones.....                                 | 6        |
| 1.1.3.1. Almacenamiento de Hidrógeno.....                        | 6        |
| 1.1.3.2. Baterías de Níquel e Hidruro Metálico.....              | 8        |
| 1.1.3.3. Purificación de Hidrógeno.....                          | 8        |
| 1.1.3.4. Otros usos.....   | 8        |
| 1.2. Aspectos generales de baterías.....                         | 9        |
| 1.2.1. Concepto.....   | 9        |
| 1.2.2. Termodinámica y Cinética.....                             | 12       |
| 1.2.3. Aspectos operacionales.....                               | 18       |
| 1.2.3.1. Carga y descarga.....                                   | 18       |
| 1.2.3.2. Autodescarga.....                                       | 20       |
| 1.3. La batería de Níquel e Hidruro Metálico.....                | 20       |
| 1.3.1. Desarrollo.....   | 20       |
| 1.3.2. Características generales.....                            | 21       |
| 1.3.3. Aleaciones de interés para baterías de NiMH.....          | 24       |
| Referencias.....   | 27       |

|   |           |
|---|-----------|
| <b>2. El sistema Zr-Cr-Ni</b>   | <b>30</b> |
| 2.1. Introducción.....  | 30        |
| 2.2. Fases de Laves: la aleación ZrCr <sub>2</sub> .....                      | 31        |
| 2.3. Sustitución parcial de Cr por Ni.....                                    | 35        |
| Referencias.....  | 38        |
| <b>3. Materiales y métodos</b>  | <b>40</b> |
| 3.1. Preparación de las aleaciones.....                                       | 40        |
| 3.2. Técnicas de caracterización metalúrgica de los compuestos.....           | 43        |
| 3.2.1. Difracción de Rayos X ( <i>DRX</i> ).....                              | 43        |
| 3.2.2. Microscopía Electrónica de Barrido ( <i>MEB</i> ).....                 | 44        |
| 3.2.3. Espectroscopía Dispersiva en Energía ( <i>EDE</i> ).....               | 45        |
| 3.3. Caracterización electroquímica de las aleaciones.....                    | 45        |
| 3.3.1. Diseño de la celda electroquímica.....                                 | 45        |
| 3.3.2. Técnicas.....  | 47        |
| 3.3.2.1. Ciclado de carga-descarga.....                                       | 48        |
| 3.3.2.2. Descarga a distintos regímenes de corriente.....                     | 49        |
| 3.3.2.3. Espectroscopía de Impedancia Electroquímica.....                     | 49        |
| 3.4. Molienda mecánica.....   | 50        |
| Referencias.....  | 52        |
| <b>4. Modelo de respuesta de impedancia del electrodo de hidruro metálico</b> | <b>53</b> |
| 4.1. Introducción.....  | 53        |
| 4.2. Consideraciones generales.....   | 53        |
| 4.3. Desarrollo del modelo.....   | 59        |
| 4.3.1. Aspectos generales.....  | 59        |
| 4.3.2. Balance de materia en la fase líquida.....                             | 63        |

|  |    |
|--|----|
| 4.3.3. Ley de Ohm en la fase líquida.....                                    | 63 |
| 4.3.4. Ley de Ohm en la fase sólida.....                                     | 64 |
| 4.3.5. Transporte de los átomos de Hidrógeno en las partículas de metal..... | 64 |
| 4.3.6. Ecuaciones de velocidad para las reacciones involucradas.....         | 65 |
| 4.3.7. Sumario de las ecuaciones del modelo.....                             | 66 |
| 4.3.8. Función de impedancia total del electrodo.....                        | 67 |
| 4.4. Ajuste de datos experimentales obtenidos por <i>EIE</i> .....           | 74 |
| 4.5. Lista de parámetros y símbolos utilizados en este capítulo.....         | 75 |
| Referencias.....   | 77 |

## **5. Efecto del tratamiento térmico de recocido sobre las propiedades electroquímicas de la aleación Zr(Cr<sub>0,5</sub>Ni<sub>0,5</sub>)<sub>2</sub>** 79

|   |    |
|---|----|
| 5.1. Introducción.....                                  | 79 |
| 5.2. Preparación y caracterización de las muestras..... | 80 |
| 5.3. Caracterización electroquímica.....                | 86 |
| 5.4. Conclusiones.....                                  | 93 |
| Referencias.....  | 95 |

## **6. Estudio de compuestos de fórmula Zr<sub>x</sub>Ni<sub>y</sub>** 97

|   |     |
|---|-----|
| 6.1. Procedimiento experimental.....  | 97  |
| 6.2. Resultados obtenidos de la caracterización metalúrgica.....  | 97  |
| 6.3. Estudios de ciclado de carga-descarga, <i>HRD</i> y <i>EIE</i> .....   | 102 |
| 6.3.1. Parámetros obtenidos por ajuste de los datos de <i>EIE</i> .....   | 106 |
| 6.4. Agregado de compuestos Zr <sub>x</sub> Ni <sub>y</sub> a la aleación Zr(Cr <sub>0,5</sub> Ni <sub>0,5</sub> ) <sub>2</sub> ..... | 108 |
| 6.5. Discusión y conclusiones.....  | 113 |
| Referencias.....  | 115 |

|   |            |
|---|------------|
| <b>7. Conclusiones generales y perspectivas futuras</b> | <b>116</b> |
| 7.1. Conclusiones generales.....                        | 118        |
| 7.2. Perspectivas futuras.....                          | 118        |
| <br>  |            |
| <b>Lista de Símbolos y Abreviaturas</b>                 | <b>119</b> |
| <br>  |            |
| <b>Publicaciones y Presentaciones</b>                   | <b>122</b> |