

Índice

| | |
|--|-----|
| Dedicatoria | i |
| Índice | iii |
| Resumen | vii |
| Abstract | ix |
| Capítulo 1 | 1 |
| Introducción | 1 |
| 1.1. Situación energética actual. Hidrógeno como vector energético. Aplicaciones y limitaciones. | 1 |
| 1.2. Almacenamiento. Materiales almacenadores. | 8 |
| 1.3. Objetivos. | 15 |
| Capítulo 2 | 17 |
| Método experimental | 17 |
| 2.1 Muestras y materiales de partida. | 18 |
| 2.2 Método de síntesis. | 20 |
| 2.3 Descripción breve de los equipos y técnicas experimentales. | 24 |
| 2.3.1 Medición de reacciones con hidrógeno mediante técnicas volumétricas (Equipo tipo Sieverts). | 24 |
| 2.3.2 Difracción de Rayos X (XRD). | 29 |
| 2.3.3 Microscopía Electrónica de Barrido (SEM). | 32 |

| | | |
|-------|---|----|
| 2.3.4 | Calorimetría Diferencial de Barrido (DSC). | 35 |
| 2.3.5 | Fisorción de Nitrógeno. | 36 |
| 2.3.6 | Espectroscopia Infrarroja por Transformada de Fourier (FTIR). | 38 |
| 2.4 | Métodos numéricos. | 39 |
| 2.4.1 | Resolución de ecuaciones diferenciales acopladas. | 39 |
| 2.4.2 | Determinación de los parámetros de ajuste de las curvas experimentales. | 41 |
| | Capítulo 3 | 47 |
| | Sistema MgH ₂ -Ni | 47 |
| 3.1 | Introducción al sistema Magnesio-Ni. | 48 |
| 3.2 | Preparación de la muestra. Análisis preliminares. | 51 |
| 3.3 | Comportamiento termodinámico. | 58 |
| 3.4 | Comportamiento cinético. | 62 |
| 3.5 | Análisis posterior al ciclado. | 69 |
| 3.6 | Efecto de diversos aditivos. | 73 |
| 3.6.1 | Muestra MNLB. | 74 |
| 3.6.2 | Muestra MNL. | 82 |
| 3.6.3 | Muestras M2NLB, (M2N)LB0.5 y (M2N)LB2. | 87 |
| 3.7 | Conclusiones. | 91 |
| | Capítulo 4 | 93 |
| | Modelado cinético del sistema MgH ₂ -Ni | 93 |

| | | |
|-------|---|-----|
| 4.1 | Marco teórico del modelado y aplicaciones. Efectos de los diferentes portamuestras sobre el comportamiento térmico del sistema. Modelos previos propuestos. | 94 |
| 4.2 | Modelo del sistema a altas temperaturas. | 109 |
| 4.2.1 | Dependencia con la temperatura. | 109 |
| 4.2.2 | Dependencia con el grado de avance. | 112 |
| 4.2.3 | Dependencia con la presión. | 114 |
| 4.2.4 | Ecuación general y modelado preliminar. | 116 |
| 4.2.5 | Modelado definitivo. | 120 |
| 4.3 | Modelo del sistema a bajas temperaturas. | 124 |
| 4.3.1 | Dependencia con la temperatura. | 125 |
| 4.3.2 | Dependencia del grado de avance. | 128 |
| 4.3.3 | Dependencia con la presión. | 133 |
| 4.3.4 | Ecuación general y modelado. | 134 |
| 4.4 | Comportamiento cinético global del sistema y conclusiones. | 136 |
| | Capítulo 5 | 141 |
| | Sistema $2\text{LiBH}_4\text{-MgH}_2$ catalizado con Ni | 141 |
| 5.1 | Introducción a los sistemas de alta capacidad de almacenamiento. | 143 |
| 5.2 | Preparación de las muestras. Análisis preliminares. | 145 |
| 5.3 | Comportamiento termodinámico. | 150 |

| | | |
|---|---|-----|
| 5.4 | Comportamiento cinético. | 159 |
| 5.5 | Efectos del ciclado. | 164 |
| 5.6 | Conclusiones. | 167 |
| Capítulo 6 | | 169 |
| Sistema $2\text{LiBH}_4\text{-MgH}_2$ catalizado con Ni y CNT | | 169 |
| 6.1 | Preparación de la muestra. Análisis preliminares. | 170 |
| 6.2 | Comportamiento termodinámico y cinético. | 177 |
| 6.3 | Estudio de los caminos de reacción del sistema a diferentes temperaturas. | 182 |
| 6.4 | Conclusiones. | 190 |
| Capítulo 7 | | 193 |
| Conclusiones y perspectivas | | 193 |
| 7.1 | Conclusiones de los sistemas basados en Magnesio. | 193 |
| 7.2 | Conclusiones de los sistemas basados en $2\text{LiBH}_4\text{-MgH}_2$. | 197 |
| 7.3 | Perspectivas. | 200 |
| Referencias | | 203 |
| Agradecimientos | | 211 |
| Listado de Publicaciones | | 213 |