

Índice de contenidos

Índice de símbolos	v
Índice de contenidos	vii
Índice de figuras	xi
Índice de tablas	xv
Resumen	xvii
Abstract	xix
1. Introducción	1
1.1. Materiales formadores de hidruro	2
1.1.1. Hidruros metálicos (MH)	2
1.1.2. Familia AB ₅	6
1.1.3. Aplicaciones	12
1.2. Purificación de hidrógeno	13
1.2.1. Prácticas industriales	13
1.2.2. Separación de hidrógeno mediante MH	15
1.2.3. Oportunidades identificadas	18
1.3. Objetivos de esta Tesis	20
2. Métodos experimentales	23
2.1. Técnicas generales	23
2.1.1. Difracción de rayos X (XRD)	23
2.1.2. Microscopía electrónica de barrido (SEM)	23
2.1.3. Espectrofotometría de absorción atómica (AAS)	24
2.1.4. Cromatografía gaseosa (GC)	24
2.1.5. Horno de arco	24
2.2. Técnicas específicas	24
2.2.1. Método de Sieverts	25

2.2.2.	Método de flujo másico	26
2.2.3.	Obtención de parámetros termodinámicos	29
2.2.4.	Obtención directa de la relación de van't Hoff	30
2.3.	Desarrollo de equipo ciclador	31
2.3.1.	Diseño y construcción	31
2.3.2.	Calibración	36
2.3.3.	Software	38
2.3.4.	Funcionamiento	41
2.4.	Análisis de errores	43
2.4.1.	Cinética de reacción	44
2.4.2.	Isotermas de Presión-Composición	50
2.4.3.	Valores termodinámicos	52
2.5.	Sumario	53
3.	Desarrollo de materiales	55
3.1.	Preparación	55
3.2.	Caracterización de los materiales	60
3.2.1.	Estructura	60
3.2.2.	Morfología	61
3.3.	Caracterización de la reacción	63
3.3.1.	Propiedades de equilibrio	63
3.3.2.	Cinética	69
3.4.	Degradación por ciclado en hidrógeno	71
3.4.1.	Decrepitación	71
3.4.2.	Estructura	72
3.4.3.	Capacidad	74
3.4.4.	Cinética	76
3.5.	Interacción con contaminantes: CO	78
3.5.1.	Cinética	78
3.5.2.	Efecto de la temperatura	83
3.6.	Sumario	84
4.	Modelado de la reacción	87
4.1.	Presión de equilibrio	88
4.2.	Cinética descriptiva	90
4.2.1.	Dependencia con la presión	91
4.2.2.	Dependencia con el grado de avance	93
4.2.3.	Dependencia con la temperatura	96
4.3.	Mecanismos de reacción	99

4.3.1. Regímenes considerados	100
4.3.2. Resultados	104
4.4. Simulación de condiciones experimentales	107
4.4.1. Implementación computacional	107
4.4.2. Estimación de parámetros	108
4.5. Sumario	113
5. Separación de hidrógeno	115
5.1. Diseño a escala de prototipo	115
5.1.1. Esquema conceptual	115
5.1.2. Material formador de hidruro	118
5.1.3. Diseño de los reactores	119
5.1.4. Construcción	123
5.2. Funcionamiento	125
5.2.1. Software de control	125
5.2.2. Calibraciones	125
5.2.3. Prueba del concepto	126
5.3. Simulaciones	130
5.3.1. Estimación de parámetros	130
5.3.2. Simulaciones del proceso	134
5.3.3. Efecto de parámetros de diseño	137
5.4. Sumario	141
6. Aplicaciones	143
6.1. Recuperación de hidrógeno en FAE	143
6.2. Recuperación de hidrógeno en CONUAR	145
6.3. Remoción de hidrógeno en CAE	145
7. Conclusiones generales	149
Bibliografía	153
Publicaciones	179
Agradecimientos	189