



Universidad del Mar Campus Puerto Ángel

Determinación de las energías de combustión y entalpías de formación de los nanotubos de carbono de mallado simple y múltiple

Tesis

Que para obtener el Título Profesional de
Ingeniero Ambiental

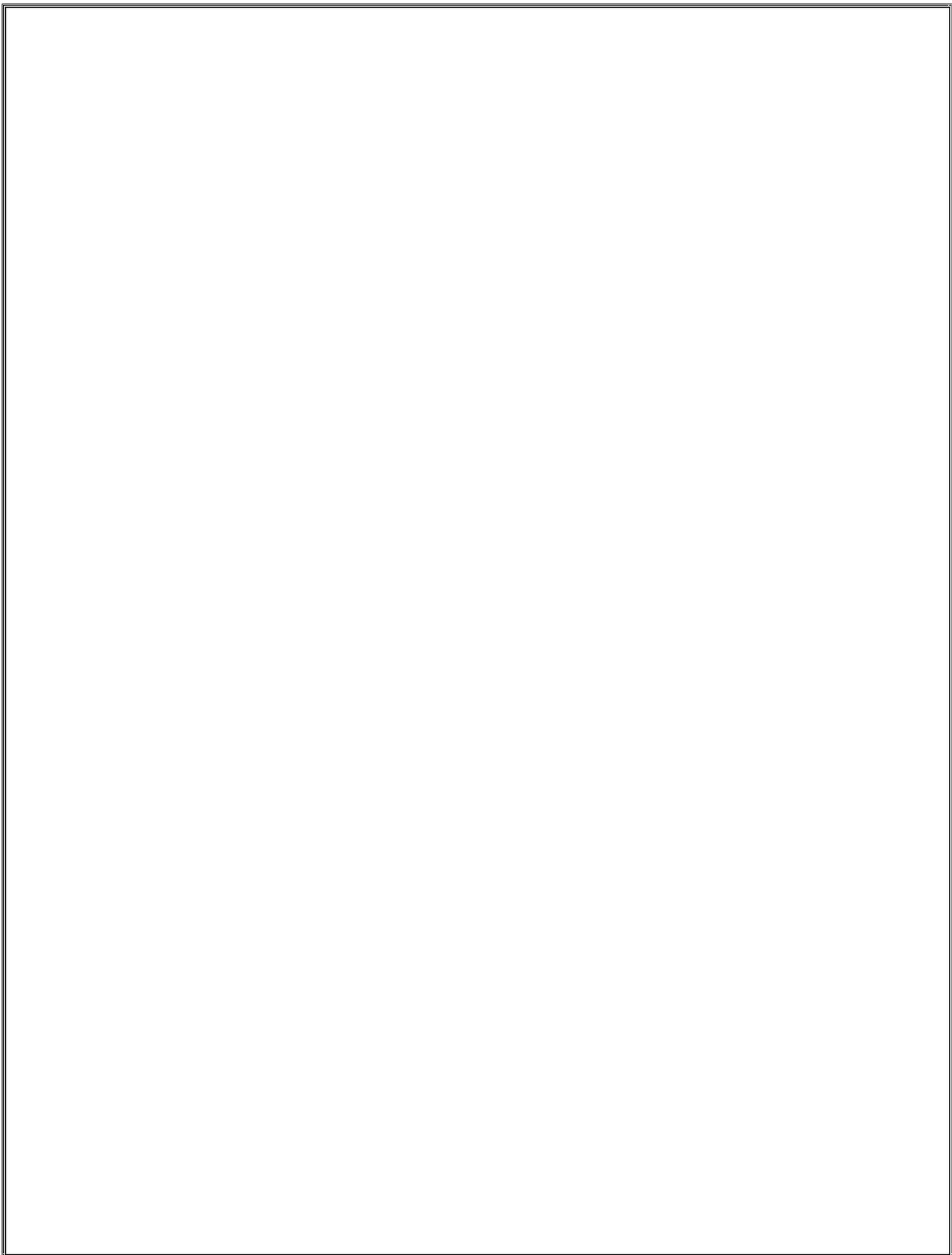
Presenta:

Angel Eduardo De Los Santos Acosta

Director de Tesis:

Dr. Juan Mentado Morales

Puerto Ángel, Oaxaca a Octubre del 2017



Agradecimientos

A mi director Juan, por su paciencia y apoyo incondicional para la realización de éste trabajo.

Gracias a mis papás, los cuales me dejaron las bases de quien soy ahora, y cuyas enseñanzas de vida quedarán para siempre.

A mis amigos: Oscar, Ani, Eric, Niche que me llenaron de buenos momentos y ánimo durante la culminación de este trabajo.

A mi compañeros de carrera, Vicente, Anyeli, Jared, Mayra, Liz, y Juan Manuel, y todos los demás que se quedaron en el camino. Por supuesto que también a todos mis profesores, los cuales han contribuido a mi crecimiento académico.

A mi madrina espiritual Sam, que estuvo presente en mi formación desde que era niño, y que durante todo este tiempo me ha brindado su apoyo incondicional y llenado de consejos de vida.

A la familia cósmica. A todas esas personas que me apoyaron en diversas ocasiones y de diversas maneras, y gracias a las cuales pude seguir adelante con una mejor actitud. No alcanzaría esta sección para nombrarlas a todas. Y por supuesto, todas esas personas que se adelantaron en éste plano, pero cuyas enseñanzas quedarán para toda la vida.

A todos aquellos que con críticas y hechos no tan agradables en su momento, pero que a la larga han ayudado para fortalecer mi persona, y me han hecho ser quien soy actualmente.

A la Universidad del Mar. Ésta institución que me ha apoyado de diversas maneras y gracias a la cual pude concluir de buena manera mi formación.

Resumen

En presente trabajo se determinaron los valores de entalpía y energía interna en condiciones estándar de los nanotubos de carbono de mallado simple y mallado múltiple usando un semi micro calorímetro de combustión. Los nanotubos de carbono fueron previamente purificados para eliminar impurezas durante la fabricación de los mismos.

Para la determinación de los valores energéticos de los nanotubos fue necesario realizar una calibración del equipo calorimétrico, por lo que se empleó un estándar primario el cual fue ácido benzoico, el cual es recomendado por el NIST (National Institute of Standards and Technology).

Para asegurar la combustión completa de los nanotubos de carbono fue necesario usar aceite de parafina, sustancia que sirvió como sustancia auxiliar en las combustiones, por lo que fue necesario determinar los valores energéticos a través de calorimetría de combustión.

Los valores energéticos de los nanotubos son reportados en unidades de energía/masa y energía/mol carbono, debido se debe a que los nanotubos de carbono no presentan una masa molar definida, por lo que en su lugar se les caracteriza por las dimensiones promedio de cada material; las energías de combustión de los nanotubos fueron de -27636.9 ± 8.1 kJ/g para el de mallado simple y -32347.3 ± 15.3 kJ/g para el de mallado múltiple; dichos valores son comparados con otros alótropos de carbono, como carbón, diamante y fullerenos.

La determinación de estos parámetros termodinámicos aporta importante información para la adecuada manipulación y creación de materiales en los procesos de síntesis selectiva de nanotubos de carbono. De igual manera, este trabajo se establece como punto de referencia para trabajos posteriores, debido a la poca información libre que se tiene sobre valores termodinámicos de nanotubos de carbono.

También, se muestran los valores de las entalpías molares de formación obtenidos por el grupo de trabajo y que fungen como complemento de la información que se desarrolló en esta tesis.

PRODUCTOS OBTENIDOS

- Participación Oral en el 2° Coloquio Nacional de Calorimetría, Análisis Térmico, y Termodinámica, Puebla. Del 6 al 8 de abril del 2017. El trabajo presentado llevó por nombre: **“Energía interna de combustión de los nanotubos de mallado simple (SWCNT) y múltiple (MWCNT)”**
- Artículo científico aceptado para su publicación en el Journal of Thermal Analysis and Calorimetry.
Juan Mentado Morales*, Guadalupe Mendoza Pérez, Ángel Eduardo De Los Santos Acosta, Ever Peralta Reyes, Alejandro Regalado Méndez. **Energies of combustion and enthalpies of formation of carbón nanotubes.** Journal of Thermal Analysis and Calorimetry. DOI [10.1007/s10973-017-6741-2](https://doi.org/10.1007/s10973-017-6741-2).

Índice General

Simbología.....	1
1.- INTRODUCCIÓN	2
2.- MARCO TEÓRICO	4
2.1.-Calorimetría.....	4
2.1.1.- Tipos de calorímetros	4
2.1.2.- Calorimetría de Combustión	5
2.1.3.- Calorimetría de semi-micro combustión	7
2.1.4.- Calibración y validación del calorímetro	8
2.1.5.- Cálculo del incremento de temperatura.....	9
2.1.6.- Cálculo de la masa real.....	10
2.1.7.- Cálculos de la energía interna a condiciones estándar	11
2.2.- Alótropos de Carbono.	13
2.2.1.- Grafito	13
2.2.2.- Diamante	14
2.2.3.- Fullerenos	15
2.3.- Nanotubos de carbono.....	16
2.3.1.- Métodos de producción	17
2.3.2.- Principales aplicaciones de CNTs	20
3.- ANTECEDENTES.....	22
4.- OBJETIVOS	24
4.1.- Objetivo general	24
4.2.- Objetivos específicos	24
5.- HIPÓTESIS.....	25
6.- JUSTIFICACIÓN	26

7.- DESARROLLO EXPERIMENTAL.....	27
7.1.- Materiales	27
7.1.1 Auxiliares	27
7.2.- Equipos.....	28
7.3.- Ensamblaje del calorímetro.....	28
7.4.- Calibración del equipo	29
7.5.- Purificación de los SWCNT.....	30
7.6.- Experimentos de combustión.....	31
8.- RESULTADOS Y DISCUSIONES.....	34
8.1.- Propiedades físicas de los compuestos.....	34
8.2.- Equivalente calorimétrico	35
8.3.-Energía de combustión del aceite de parafina.....	37
8.4.- Energías de combustión de los nanotubos de carbono.....	38
8.5.- Entalpía de combustión y de formación estándar.....	42
8.6.- Análisis energético entre alótropos de carbono	43
9.- CONCLUSIONES	51
10.- REFERENCIAS	53

Índice de Tablas

Tabla 1. Comparación entre los nanotubos de carbono de mallado simple y múltiple.	17
Tabla 2. Aplicaciones de los nanotubos de carbono	21
Tabla 3. Propiedades físicas de los materiales participantes en los experimentos de combustión	34
Tabla 4: Resultados de combustión de ácido benzoico (NIST 39j) a $T = 298.15$ K	36
Tabla 5. Comparación del equivalente calorimétrico y el porcentaje de error	37
Tabla 6. Resultados de combustión del aceite de parafina a $T = 298.15$ K and 0.1 MPa	38
Tabla 7. Resultados de los experimentos de combustión del SWCNT a 298.15 K y 0.1 MPa	40
Tabla 8. Resultados de los experimentos de combustión del MWCNT a 298.15 K y 0.1 MPa	41
Tabla 9. Energías y entalpías másicas de combustión de los CNTs en J/g	43
Tabla 10. Energías de combustión de fulerenos C_{60}	44
Tabla 11. Masas y cantidades energéticas de experimentos con fulerenos C_{70} a condiciones estándar	45
Tabla 12. Energías de combustión másicas de alótropos de carbono.....	46
Tabla 13. Entalpías molares de combustión y formación de CNT en fase sólida	48

Índice de Figuras

Figura 1.- Calorímetro de bomba estática y sus componentes.....	7
Figura 2.- Curva típica de un experimento de combustión en un calorímetro.....	9
Figura 3. Rutas empleadas para el cálculo de $\Delta_c U^\circ$	11
Figura 4. Estructura del grafito	13
Figura 5. Estructura del diamante.....	14
Figura 6. Fulereo C_{60}	15
Figura 7. Nanotubos de mallado simple (SWCNT) y múltiple (MWCNT)	16
Figura 8. Diagrama esquemático del aparato de DA	18
Figura 9. Diagrama esquemático del aparato de DCV.....	19
Figura 10. Diagrama esquemático del aparato de ablación laser.....	20
Figura 11. Diagrama general de un calorímetro de micro-combustión.....	29
Figura 12: Diseño del Experimento.....	31
Figura 13. Energías de formación de alótropos de carbono.....	49

Simbología

CNT	Nanotubos de carbono
SWCNT	Nanotubo de mallado simple
MWCNT	Nanotubo de mallado múltiple
C_{60}	Fulereno de 60 carbonos
C_{70}	Fulereno de 70 carbonos
T	Temperatura
P	Presión
C_p	Capacidad calorífica
ΔU_{ign}	Energía de ignición
ΔU_{IBP}	Energía del proceso isotérmico de la bomba
$\Delta_c U^\circ$	Energía de combustión molar interna estándar
$\Delta_c H^\circ$	Entalpía de combustión molar estándar
$\Delta_f H^\circ$	Entalpía de formación estándar
$\varepsilon(\text{calor})$	Equivalente calorimétrico del calorímetro
ΔT_c	Incremento de temperatura corregido
m_{ab}	Masa del ácido benzoico
m_{aux}	Masa del auxiliar en la reacción de combustión
ΔT_{corr}	Término de corrección de temperatura
$\Delta_f G$	energía libre de Gibbs de formación
H	Entalpía
S	Entropía
U	Energía interna
$\Delta_c u_{ab}$	Energía interna de combustión del ácido benzoico
ΔU_w	Término de correcciones de Washburn