

Nuestra Facultad

PROYECTOS Y PROGRAMAS

PROYECTO COMFUTURO: NUEVOS MATERIALES GRAFÉNICOS PARA LA SÍNTESIS DE METANOL A PARTIR DE CO₂ E H₂

Desde el 1 de febrero de este año 2019, la doctora Ana Belén Dongil desarrolla su proyecto ComFuturo en el Instituto de Catálisis y Petroleoquímica, en el grupo de Diseño Molecular de Catalizadores Heterogéneos, unidad asociada de la UNED.

El objetivo del programa ComFuturo (<http://comfuturo.es>), una iniciativa de la Fundación General CSIC, es retener talento joven investigador en nuestro país a través de la colaboración público-privada. Los proyectos tienen que tener potencial para resolver problemas de interés industrial y social a través de investigación altamente innovadora.

En la primera edición del programa (2015) se financiaron 15 proyectos de investigación, de los que resultaron un total de 92 artículos en revistas de alto impacto, 4 solicitudes de patente y 1 solicitud de modelo de utilidad, que muestran la gran aplicabilidad industrial de los mismos. Además, el programa ComFuturo ha sido reconocido en la campaña europea de Responsabilidad Social Enterprise 2020 como actuación colaborativa público-privada de alto impacto para la empleabilidad de los jóvenes.

En la vigésima segunda edición del programa, otros 15 proyectos han resultado financiados. Entre las empresas que colaboran en esta edición de ComFuturo se encuentran Banco Santander, Acerinox, Fundación Domingo Martínez, Naturgy, Suez y Fundación Cepsa, esta última promovió un proyecto para la obtención y conversión de compuestos con grupos hidroxilo relacionados con la industria petroquímica. Con esta motivación, la investigadora presentó un proyecto con el objetivo de convertir el CO₂ que se genera industrialmente en metanol.

Motivación del proyecto

La disminución de las reservas de combustibles fósiles y la creciente preocupación para disminuir

el CO₂ liberado a la atmósfera, ha dirigido el interés en encontrar nuevas fuentes de energía, así como moléculas plataforma procedentes de fuentes renovables, que permitan desplazar al petróleo como materia prima. No obstante, a pesar del gran auge de la energía renovable, su uso será insuficiente para alcanzar los objetivos de reducción de CO₂ que permitan mantener el aumento de la temperatura global por debajo de 2°C.¹ Las plantas de producción de electricidad a partir de combustibles fósiles generan más del 40% de las emisiones de CO₂ del total de 31 GtCO₂ que se producen, y un 20% procede de las refinerías, de las industrias de producción de acero y de cemento. Asimismo, se espera que estas últimas aumenten sus emisiones en un 35% hasta 2050. Esto es debido a la mayor demanda de productos e infraestructuras, entre las que se encuentran también las tecnologías renovables como la solar o la eólica, que requieren estos materiales.

Para conseguir disminuir las emisiones de CO₂ a la atmósfera y mantener la concentración atmosférica de CO₂ por debajo de 450 ppm (450 scenario), se han establecido diversas medidas como la mejora de eficiencia energética o el aumento de energías renovables. Entre estas medidas, tal y como muestra la Figura, la captura y almacenamiento de CO₂ (carbon capture, use and storage, CCUS) deberá suponer al menos un 24% de la reducción de emisiones de CO₂ totales (Figura 1).² Por ello, se han desarrollado sis-

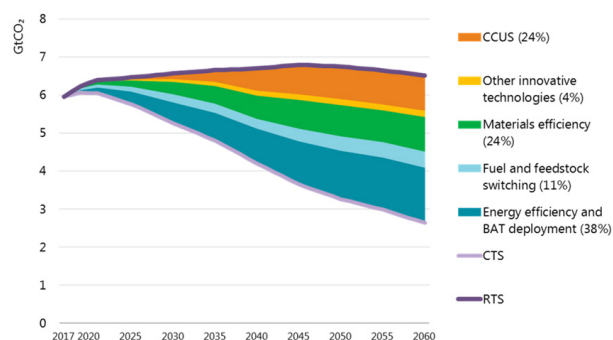


Figura 1. Reducción de emisiones para sectores clave (cemento, hierro y acero y químicos) según la estrategia de mitigación. Fuente Ref.2

temas de captura de CO_2 que se podrán implementar en un futuro inmediato. Por otro lado, al utilizar el CO_2 como materia prima en lugar de simplemente almacenarlo, estos sistemas podrían ser hasta un 70% más baratos.³ En este sentido, el propio CO_2 es una excelente molécula de partida para emplearlo como fuente económica, segura y renovable de carbono y obtener así productos de alto valor añadido.

Economía del Metanol, hacia un futuro sostenible

Dentro de las posibles transformaciones del CO_2 , la obtención de metanol es especialmente interesante. Esto es así porque las propiedades físico-químicas del metanol (alta densidad de energía, líquido a temperatura ambiente) hacen que se pueda emplear directamente como combustible, siendo por tanto una solución segura y barata para el almacenamiento de energía a gran escala. Además, se puede transportar de manera segura y transformar en otros productos como olefinas, a partir de los que se obtienen productos de alto valor añadido como resinas o plásticos que habitualmente se generan a partir de fuentes fósiles. Por tanto, empleando metanol se evitarían inversiones en nuevas infraestructuras de almacenamiento y transporte. Los sistemas de captura de CO_2 pueden acoplarse con aquellos que produzcan

hidrógeno por electrolisis para producir metanol. De esta manera estaremos convirtiendo el exceso de energía renovable en un producto líquido, seguro y fácilmente transportable.

Cómo se produce actualmente el Metanol

A escala industrial, el metanol se obtiene a partir de gas de síntesis ($\text{CO}/\text{CO}_2/\text{H}_2$), empleando varios catalizadores basados en $\text{CuO}/\text{ZnO}/\text{Al}_2\text{O}_3$ a altas presiones 50-100 atm y temperaturas 450-600 K. El objetivo en la actualidad es sustituir este proceso por la síntesis de metanol a partir de mezclas CO_2 e H_2 libres de CO .

El reto científico es que el CO_2 es una molécula difícil de activar y su transformación requiere un elevado consumo de energía. Por ello, para hacer el proceso viable, son necesarios materiales capaces de llevar a cabo la transformación en condiciones suaves y además obtener el producto de interés, metanol, de manera selectiva para evitar procesos de separación posteriores.

Retos científicos de la hidrogenación de CO_2 a metanol

Se han estudiado una gran variedad de catalizadores, la mayoría basados en Cu como principal fase



Foto 1. Reunión ComFuturo del proyecto de la Dra. Dongil junto representantes de la Fundación General del CSIC, Fundación CEPSA y CEPSA.

activa. Entre estos catalizadores, el sistema Cu/ZnO/Al₂O₃ ha resultado el más atractivo. No obstante, para su aplicación a nivel industrial, su actividad es insuficiente y la selectividad se ve disminuida por la formación de agua que tiene lugar paralelamente.⁴ Algunos catalizadores basados en metales nobles, como oro o plata, han mostrado buenos resultados, pero resultan materiales demasiado caros para su uso a gran escala. Con el objetivo de mejorar los resultados es necesario buscar materiales que adsorban fácilmente el CO₂ y disocien el hidrógeno para obtener selectivamente metanol. En este sentido, interesan materiales de naturaleza básica, alta superficie específica y con capacidad para estabilizar nanopartículas de metal que sean altamente activas.

Propuesta del proyecto

El proyecto ComFuturo propone el estudio de nanomateriales basados en materiales grafénicos. Este tipo de materiales poseen alta área superficial y propiedades electrónicas interesantes debido a su estructura química, ya que posee multitud de enlaces carbono-carbono aromático.

El uso de materiales grafénicos se ha popularizado gracias a la gran disponibilidad de la materia prima y su fácil preparación, lo que ha ido disminuyendo sus costes de producción. Además, su química superficial puede ajustarse fácilmente mediante la introducción de heteroátomos que pueden modificar las propiedades del grafeno. Específicamente para la reacción de hidrogenación de CO₂, los materiales de carbono dopados con nitrógeno pueden presentar una alta capacidad de adsorción de CO₂ y debido a la deficiencia electrónica que la incorporación de nitrógeno genera en los átomos de carbono adyacentes, se puede mejorar la adsorción de hidrógeno, favoreciendo la reacción.

Por otro lado, se propone emplear como fase activa catalítica nanopartículas de carburos de molibdeno y wolframio, que presentan una estructura similar a los metales nobles, pero de mucho menor coste. La presencia del elemento dopante, puede aumentar la estabilidad de dichas partículas y evitar su sintetizado o lixiviado, ya que el nitrógeno incorporado es capaz de generar una distorsión de la nube π de la estructura grafénica ofreciendo orbitales vacíos o adicionales.

Este tipo de estructuras pueden favorecer la formación de determinados productos si las energías de adsorción de reactivos y productos son adecuadas.

Se espera que al finalizar los tres años de proyecto, se obtenga un sistema catalítico para la hidrogenación de CO₂ que sea activo, selectivo a la formación de metanol y estable en sucesivos ciclos en presencia de agua. Todos ellos son requisitos para conseguir un sistema de generación de metanol sostenible.

Como inicio del proyecto, la investigadora se reunió con los responsables del Centro de Investigación de CEPESA, Javier Lázaro y Juana Frontela, con la Fundación CEPESA y con la Fundación General CSIC, en las instalaciones de CEPESA en Alcalá de Henares (Madrid) (Foto 1).

- [1] https://ec.europa.eu/clima/sites/campaign/pdf/post_2012_en.pdf, julio 2019
- [2] https://www.iea.org/publications/reports/TransformingIndustrythroughCCUS/?utm_content=buffer8b11c&utm_medium=social&utm_source=linkedin.com&utm_campaign=buffer, julio 2019.
- [3] <http://co2chem.co.uk/wp-content/uploads/2012/06/CCU%20in%20the%20green%20economy%20report.pdf>, julio 2019
- [4] Leonzio G (2018). State of art and perspectives about the production of methanol, dimethyl ether and syngas by carbon dioxide hydrogenation. *Journal of CO₂ Utilization* **27**, 326–354.

Ana Belén Dongil
Investigadora Comfuturo
Grupo de Diseño Molecular de Catalizadores Heterogéneos
Insto. de Catálisis y Petroleoquímica (CSIC)