

INDICE

Editorial	1
Descripción general de las soluciones de sistemas de medición de superficie para la captura, separación y almacenamiento de gases	2
Índice de abstracts II Jornada Jóvenes Investigadores del GEC 2024	8
Síntesis y Caracterización de Nuevos Materiales de Carbono Orales	10
Poster.....	11
Aplicaciones de los Materiales basados en Carbono en Generación y Almacenamiento de Energía Orales	13
Poster.....	22
Aplicaciones Innovadoras de los Materiales basados en Carbono: Salud, Industria, Medioambiente y Sostenibilidad Orales	24
Poster.....	35
Tecnologías para la Generación Sostenible de Energía Orales	44
Poster.....	45

Editores Jefe:

Covadonga Pevida García
Instituto de Ciencia y Tecnología del Carbono (CSIC)

José Luis Pinilla Ibarz
Instituto de Carboquímica (CSIC)

Editores:

Víctor Karim Abdelkader Fernández
Universidad de Granada

Noelia Alonso Morales
Universidad Autónoma de Madrid

Raúl Berenguer Betrián
Universidad de Alicante

Francisco Heras Muñoz
Universidad Autónoma de Madrid

Juana María Rosas Martínez
Universidad de Málaga

Fabián Suárez García
Instituto de Ciencia y Tecnología del Carbono (CSIC)

Editorial

La primavera de 2025 trae consigo un nuevo número especial del Boletín del Grupo Español del Carbón. Siguiendo el camino iniciado en el número 70, este boletín continúa con la labor de difusión de la ciencia, dando visibilidad a los trabajos presentados, en formato poster y comunicación oral, durante las II Jornadas de Jóvenes Investigadores, celebradas en Baeza (Jaén) del 20 al 22 del pasado noviembre. Sin duda, fueron tres días estupendos durante los cuales, no sólo disfrutamos de un enclave único, Patrimonio de la Humanidad, y de diversos eventos sociales, sino que también confirmamos que la cantera de jóvenes investigadores viene pisando fuerte. De nuevo queremos agradecer al Prof. Agustín Pérez Cadenas, Presidente del GEC, al resto del Comité Organizador de las Jornadas, a nuestros patrocinadores (IESMAT-también reciente socio protector del GEC- y las revistas Nanomaterials y C-Journal of Carbon Research de MDPI) y a los ponentes Juan Pablo Marco (Gas to Materials Technologies S.L.), Íñigo Zabalía (IESMAT S.A) y María Ros Izquierdo (OFPI-UGR) por su inestimable ayuda para que, finalmente, las jornadas hayan resultado un éxito tanto a nivel de participación como en los ámbitos científico y sociocultural. Sinceramente, ha sido un placer.

Se recogen las contribuciones correspondientes a las áreas temáticas de "Síntesis y Caracterización de Nuevos Materiales de Carbono", "Aplicaciones de los Materiales basados en Carbono en Generación y Almacenamiento de Energía" y "Aplicaciones Innovadoras de los Materiales basados en Carbono: Salud, Industria, Medioambiente y Sostenibilidad". Queremos felicitar a todos los participantes por la excelente calidad de los trabajos presentados y animarlos a seguir con tesón su camino en la investigación.

Además, en este boletín contamos con una interesante contribución de la empresa Surface Measurement

Systems (cuya distribución en España corre a cargo de IESMAT S.A.) que explora diversas soluciones de medición de superficie aplicadas a la captura, separación y almacenamiento de gases.

Esperamos que este número os resulte interesante y que os anime a seguir desarrollando vuestras investigaciones con éxito. ¡Nos vemos en la siguiente reunión!

Zoraida González
Nausika Querejeta

Síguenos en redes:

@GecBulletin 

@GrupoCarbon 

Boletín del Grupo Español del Carbón 

Descripción general de las soluciones de sistemas de medición de superficie para la captura, separación y almacenamiento de gases

Connor Hewson, Majid Naderi, Manaswini Acharya, Meishan Guo, Paola Saenz Cavazos, Damiano Cattaneo, Armando Garcia, Paul Iacomi and Daniel Burnett

Equipo de desarrollo de aplicaciones de Surface Measurement Systems - Unit 5, Wharfside, Rosemont Road, Alperton, London. HA0 4PE

El objetivo de este artículo es mostrar las soluciones de sorción como técnicas de caracterización para varias aplicaciones industriales y de investigación para la captura y el almacenamiento de gases. Se han considerado materiales porosos multifuncionales como carbón activado, zeolitas, sílices y estructuras metalorgánicas (MOF).

Introducción

El uso de sorbentes sólidos para la captura, separación y almacenamiento de gases tiene el potencial de aliviar los desafíos en materia de eficiencia energética, cambio climático y sostenibilidad. En particular, la acumulación de gases de efecto invernadero como el CO₂ se ha convertido en una prioridad mundial, con el fin de alcanzar los objetivos de descarbonización que permitirán a la humanidad alcanzar la neutralidad neta de carbono.

La caracterización de materiales prometedores para estas aplicaciones suele ser un desafío, ya que la mayoría de los estudios experimentales se basan únicamente en isotermas de equilibrio puro en lugar de composiciones y condiciones de proceso reales. Por ejemplo, las mezclas reales de gases de combustión o aire ambiente que se encuentran en condiciones de poscombustión y captura directa de aire respectivamente contienen una cantidad significativa de H₂O y otros compuestos como SO₂ y NO_x, que compiten con el CO₂ por los sitios activos del adsorbente. Además, estudiar la regeneración, reutilización y ciclabilidad de estos materiales es primordial, junto con la cinética detallada del proceso de captura.

Existen varias configuraciones de medición de sorción diferentes disponibles, por ejemplo, métodos gravimétricos y volumétricos, métodos de flujo ambiental y vacío, métodos de vacío estático y vacío dinámico. Esta nota general resume los métodos de caracterización relevantes para materiales porosos multifuncionales como carbón activado, zeolitas, adsorbentes de sílice y estructuras metalorgánicas (MOF) y sus análogos funcionalizados o modificados.

Metodología de medición

a) Métodos estáticos y dinámicos

Métodos estáticos

Las mediciones de sorción tradicionales se realizan en un modo estático o de equilibrio. En este proceso, el gas se dosifica en una cámara de muestra que contiene el sorbente. Luego se sella la cámara y se equilibra la presión. El método es más adecuado para adsorbatos con cinética rápida. La principal limitación de las mediciones estáticas es que los errores de medición se acumulan con cada dosis. Además, durante el período experimental, la presión

del sistema puede cambiar por diversas razones además de la adsorción, más comúnmente debido a fugas de vacío o cambios de temperatura. Esto puede provocar errores en las mediciones, especialmente a presiones parciales bajas.

Métodos dinámicos

En el método dinámico, se hace pasar un flujo continuo de gas o vapor sobre la muestra. El método controla tanto las tasas de entrada ascendentes como la tasa de salida descendente, controlando de manera efectiva la presión/concentración total y la tasa de flujo del adsorbato en la cámara. Los métodos dinámicos ofrecen algunas ventajas sobre los métodos estáticos, como una mejor protección contra los efectos de fuga y un aumento de la cinética de sorción de los flujos dirigidos sobre el adsorbente. El principio del método dinámico se ilustra en la Figura 1 a continuación.

b) Métodos volumétricos, gravimétricos y de ruptura

Métodos gravimétricos

En un método gravimétrico, el cambio de peso resultante de la adsorción se mide directamente utilizando una microbalanza de alta sensibilidad. La fuerza neta puede entonces equipararse a la adsorción, ya sea directamente o con una corrección de flotabilidad. Las mediciones gravimétricas son uno de los medios más precisos para medir la adsorción de gases y vapores en una amplia gama de condiciones.

Un beneficio bien conocido de los métodos gravimétricos es que normalmente requieren una pequeña cantidad de muestra: se puede utilizar tan solo 1 mg para obtener resultados confiables para mediciones de un solo componente. Otra ventaja de los sistemas gravimétricos es que se pueden utilizar tanto en modo estático como dinámico.

El sistema DVS Vacuum es un sistema gravimétrico de balanza simétrica, que ofrece una flexibilidad sin precedentes para estudiar los procesos de adsorción a presión subatmosférica, con hasta dos muestras simultáneas.

Métodos volumétricos

En los métodos volumétricos, una celda que contiene el material adsorbente se dosifica secuencialmente a partir de un volumen conocido de gas.

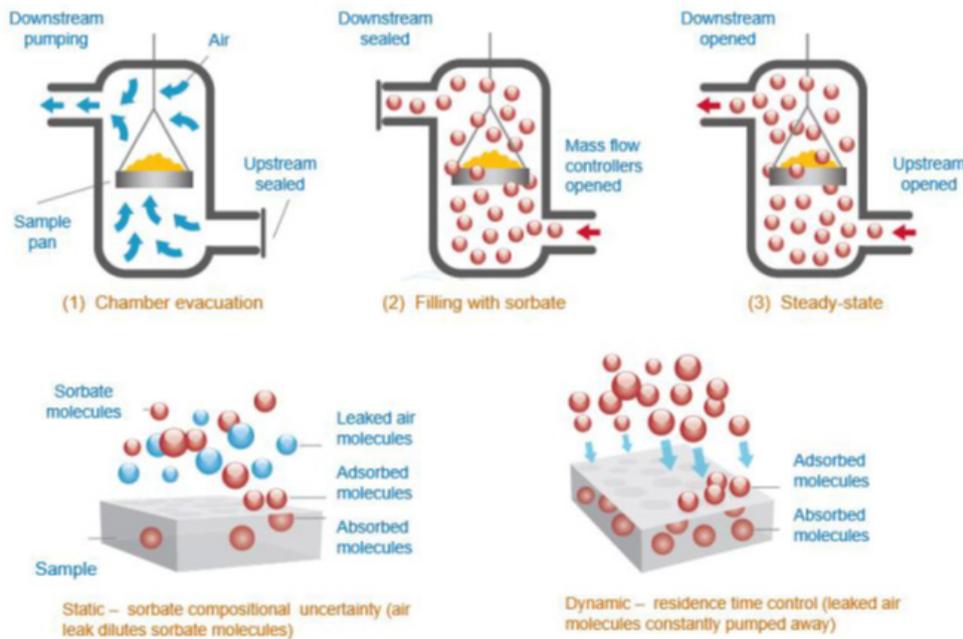


Figura 1. Principio de método de vacío dinámico.

El parámetro medido directamente en un sistema volumétrico es el cambio de presión, que luego se convierte en adsorción utilizando una ecuación de estado. Debido a esta medición indirecta, la medición de la presión del gas o del vapor no es tan precisa y sensible como la medición del cambio de peso. Para obtener la misma sensibilidad, el método volumétrico necesita mucha más muestra, lo que lleva más tiempo para alcanzar el equilibrio de sorción. Las muestras pueden ser costosas en algunos casos, por ejemplo, muestras de medicamentos para investigación de formulación, lo que puede aumentar sustancialmente los costos experimentales.

El método volumétrico es por definición un proceso estático, con los inconvenientes asociados, en particular la dificultad de equilibrio a bajas presiones. También debe tenerse en cuenta que cada dosis posterior a la primera propaga errores en las dosis anteriores, de modo que el rango de incertidumbre después de decenas de puntos puede llegar a ser mayor que la propia adsorción.

Métodos de análisis de ruptura

En un método de análisis de ruptura (BTA), una mezcla de gases conocida se hace pasar a través de un lecho o material fijo y se controla la concentración al final de una columna de adsorbente. La forma de la curva de ruptura resultante proporciona información sobre el equilibrio, el transporte en el lecho y la cinética. Es uno de los pocos métodos que se pueden utilizar para determinar datos reales de adsorción multicomponente: p. ej., captaciones individuales de dos o más componentes en una mezcla.

El sistema BTA Frontier consta de tres secciones principales: generación, lecho y detección. En la sección de generación, la mezcla deseada de gases se prepara a un caudal constante: CO₂, H₂O y/o compuestos orgánicos volátiles (VOC) son factibles en un gas portador (p. ej., N₂). A continuación, la mezcla de gases entra en una columna de adsorbente, previamente activada in situ. El perfil de concentración de cada gas se controla a la salida

de la columna mediante un conjunto de detectores independientes.

Isotermas de componentes puros

Las isotermas de componentes puros son el primer paso en la caracterización de un material poroso, evaluando la adsorción del componente o componentes de interés en función de la presión. Este paso indica si el material tiene el potencial de ser competitivo para la aplicación de destino en comparación con otros materiales de referencia. Los indicadores clave de rendimiento, como la capacidad, la capacidad de trabajo, la entalpía de adsorción y la cinética, se pueden determinar a partir de las isotermas.

a) Sorción de CO₂ en MOF

Los marcos metalorgánicos (MOF) son cúmulos cristalinos de iones metálicos conectados por enlaces orgánicos. Sus tamaños de poro ajustables y sus grandes áreas superficiales específicas (hasta 5000 m²/g) pueden facilitar el almacenamiento de alta capacidad o la separación selectiva de CO₂, gas natural, hidrocarburos, hidrógeno y otros compuestos.

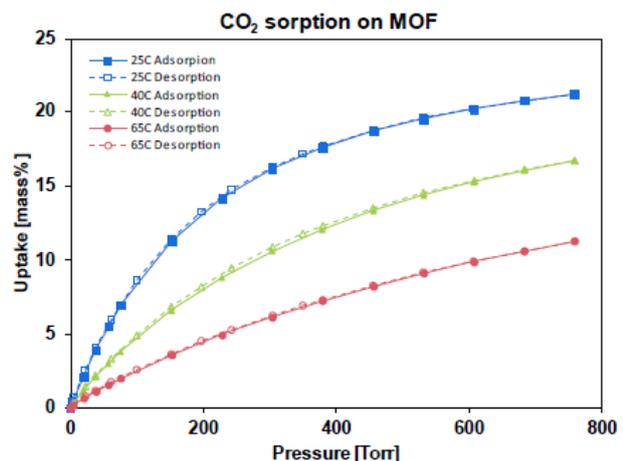


Figura 2. Sorción de CO₂ en MOFs.

La Figura 2 muestra las isotermas de sorción/desorción puras de CO₂ en un MOF prototípico a tres temperaturas diferentes, hasta 1 bar (760 bar). Este rango es muy relevante tanto para la captura de aire de fuente puntual como para la captura directa, ya que las concentraciones en estas aplicaciones alcanzan el 0,04-50% de CO₂ por volumen a presiones atmosféricas. La isoterma se puede ajustar luego con un modelo, como Langmuir o Sips, para obtener parámetros fundamentales que son cruciales para el modelado de procesos, como la simulación de lechos para procesos PSA o TSA.

Las isotermas también se pueden utilizar para determinar la entalpía de adsorción, un parámetro representativo de la fuerza de interacción del gas con el adsorbato. Las interacciones más altas significan una mejor selectividad hacia el CO₂ en comparación con otros gases en la mezcla. Desde una perspectiva de proceso, la entalpía de adsorción puede estar relacionada con la cantidad de calentamiento en el lecho, pero también con la cantidad de energía necesaria para regenerar el material. La entalpía de adsorción del MOF anterior se calcula utilizando el método Clausius-Clapeyron implementado en el módulo de Análisis avanzado de DVS en la Figura 3.

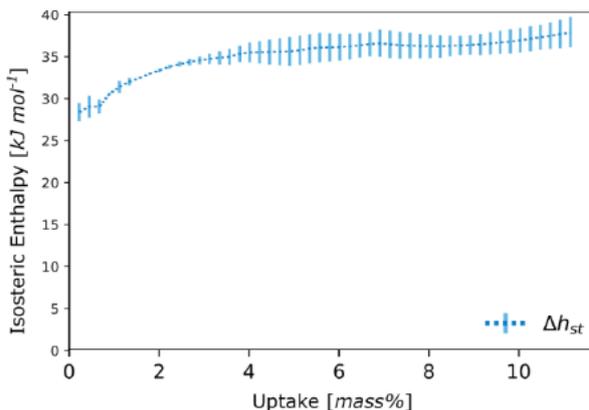


Figura 3. Entalpía de sorción de CO₂.

b) Sorción de SO₂ en zeolitas a 25 °C

El SO₂ es un contaminante común en corrientes de gas natural o de gases de combustión, con un alto potencial de toxicidad humana y ambiental. Depurarlo mediante procesos de adsorción altamente selectivos, pero aún reversibles, representaría un hito importante. En paralelo, los sensores de masa o eléctricos mejorados con materiales porosos pueden facilitar su detección incluso a concentraciones de ppm/ppb

La Figura 4 muestra la sorción de gas SO₂ en tres zeolitas prototípicas diferentes. Se encontró que el comportamiento de sorción era muy variable a 25 °C. Si bien las adsorciones en saturación están todas entre el 20% y el 35% en peso por masa, la forma de la isoterma y la reversibilidad son diferentes. La zeolita 5A tiene la adsorción más pronunciada a baja presión, con más del 15% de la sorción de SO₂ siendo irreversible al vacío. Esto haría que el material fuera un buen candidato para la depuración de SO₂. Por otro lado, la adsorción en la zeolita H-SDUSY sigue una isoterma de tipo V y es casi reversible. Si

se utiliza como catalizador en una corriente ácida, es menos probable que se envenene con SO₂.

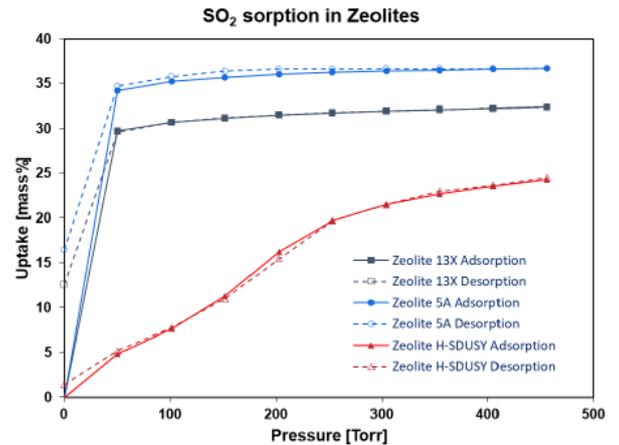


Figura 4. Sorción de SO₂ en 3 zeolitas prototípicas.

Adsorción de dos componentes

Si bien las isotermas de un solo componente se pueden utilizar como base para modelar el comportamiento de la sorción en un sistema de dos componentes, explorar la influencia de un componente sobre otro proporciona un nuevo nivel de información sobre el rendimiento de un material para la captura o separación.

Al utilizar las entradas dobles del DVS Vacuum, se pueden introducir dos componentes, ya sea de forma secuencial o simultánea. En los siguientes ejemplos, exploraremos estas opciones.

La mayoría de las mediciones directas de experimentos de cosorción presentan los mismos desafíos, uno de los cuales es cómo interpretar o deconvolucionar los datos resultantes. Incluso al comparar los datos de cosorción con las isotermas medidas con cada adsorbente expuesto de forma aislada, sigue siendo difícil determinar con certeza la proporción de adsorbente absorbido. Sin embargo, la cosorción como se observa en estos estudios se puede utilizar para dar una indicación de la preferencia de un material por la sorción de una especie sobre otra.

a) Sistema binario CO₂/H₂O en modo estático

En un modo estático, los dos componentes se introducen secuencialmente. Primero se deja que la muestra se equilibre bajo un adsorbato a una presión deseada. Después, se añade una dosis controlada de un segundo adsorbato al espacio de cabeza.

Este enfoque se utiliza para estudiar la adsorción total de CO₂ en zeolita 13X húmeda a 45 °C. La zeolita se activó bajo un vacío de 10⁻⁵ Torr a 250 °C durante 4 horas. El primer paso en la Figura 5 representa la dosificación de vapor de agua a una presión de 0,73 Torr, o 1% HR. La muestra absorbe casi el 20% en peso de agua. Luego se dosifica CO₂ de manera incremental hasta un total de 1 bar, o 760 torr. La muestra absorbe un 2% adicional de la masa.

Las mediciones de un solo componente en la literatura muestran que la zeolita 13X tiene una capacidad de

CO₂ de alrededor del 15% en peso a 1 bar, y una capacidad de H₂O de aproximadamente el 20% en peso a 1% HR. Los datos anteriores muestran claramente que los dos componentes compiten por los mismos sitios de adsorción, ya que la adsorción total no es la suma de los componentes individuales.

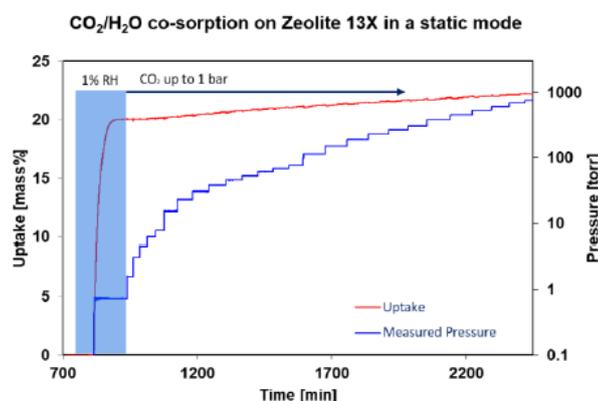


Figura 5. Adsorción de CO₂ en Zeolita 13X.

b) Sistema binario O₂/H₂O en modo dinámico

En modo dinámico, ambos componentes se introducen simultáneamente. El flujo de los dos componentes sobre la muestra alcanzará una presión objetivo en el espacio de cabeza y la muestra se equilibra en masa a una variedad de estas presiones predeterminadas. Se utilizó el vacío DVS para medir las propiedades de sorción y cosorción de la zeolita 3A utilizando un flujo dinámico del o los adsorbatos. La zeolita se activó bajo un vacío de 10⁻⁵ Torr a 300 °C durante siete horas. Luego, las mediciones de sorción se realizaron a 25 °C.

La Figura 6 muestra la isoterma de adsorción y desorción para la sorción de CO₂ con una adsorción medida al 90% P/P⁰ que es el 9,9% de la masa seca. También se muestran los resultados de la coadsorción a partir de un flujo de CO₂ y H₂O (~10:1), que muestran un aumento significativo de la adsorción: 24 % de la masa seca al 90% P/P⁰.

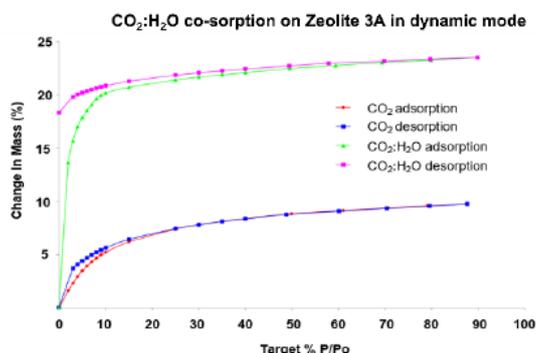


Figura 6. Sorción de CO₂ y co-adsorción de CO₂/H₂O (10:1) en zeolita 13X.

El aumento significativo de la adsorción en el experimento de coadsorción en comparación con el experimento de un solo componente demuestra la selectividad de este material para la sorción de agua en lugar de la sorción de CO₂.

Condiciones de proceso realistas

Para comprender completamente el rendimiento del material para la captura o separación de gases, los experimentos deben realizarse en condiciones de proceso realistas, con una aproximación cercana a la corriente de gas. Por ejemplo, en aplicaciones de captura de CO₂, esta corriente idealmente debería contener nitrógeno, dióxido de carbono y agua. Los estudios cíclicos en estas condiciones también pueden evaluar el rendimiento a largo plazo. Tanto DVS como BTA son herramientas cruciales en este esfuerzo, como se demostrará en dos estudios de caso.

a) DVS en condiciones reales

Se utilizó el sistema DVS Carbon para medir y analizar la adsorción y coadsorción de bajas concentraciones de CO₂ y H₂O en dos muestras de MOF MIL-101(Cr) y un análogo parcialmente funcionalizado MIL-101(Cr)-4F (1%), respectivamente, a presión y temperatura ambiente (25 °C y 1 bar), para representar las condiciones de captura de fuente puntual.

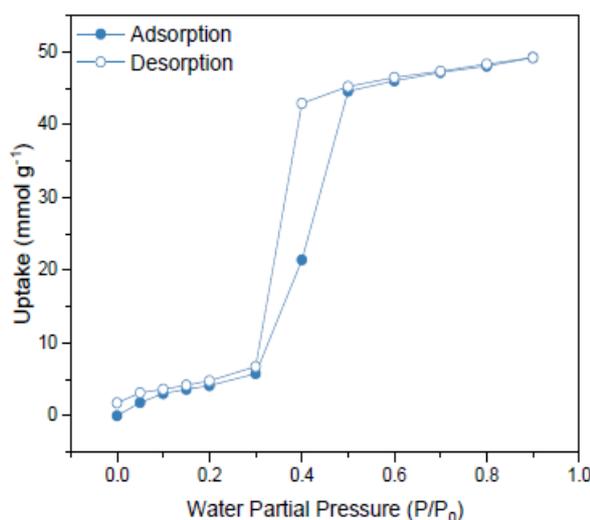


Figura 7. Isothermas de sorción y desorción de agua en material funcionalizado MIL-101(Cr)-4F (1%).

La Figura 7 muestra las isothermas de adsorción y desorción de agua del material funcionalizado. Las isothermas corresponden a las de un sólido mesoporoso ligeramente hidrofóbico o Tipo V, donde se observa una adsorción multicapa a presiones parciales bajas de 0 a 0,3, seguida de un claro ciclo de histéresis entre 0,3 y 0,6 que puede asociarse con la condensación capilar que tiene lugar en los mesoporos. La máxima adsorción de agua para el MIL-101 fluorado fue de 49,1 mmol g⁻¹, que es inferior a la informada para el material tal como se recibió en las mismas condiciones (55,5 mmol g⁻¹). Esto demuestra una hidrofobicidad general efectiva que se puede atribuir a la incorporación de átomos de flúor.

La Figura 8 muestra las isothermas de adsorción de CO₂ de ambos materiales. La adsorción es muy similar hasta 0,6 bar, pero a presiones parciales más altas, el material MIL-101(Cr) normal muestra

La Figura 8 muestra las isotermas de adsorción de CO₂ de ambos materiales. La adsorción es muy similar hasta 0,6 bar, pero a presiones parciales más altas, el material MIL-101(Cr) normal muestra una absorción de CO₂ ligeramente superior. Esto se puede atribuir al menor volumen de poro del MIL-101 fluorado en comparación con el MIL-101(Cr) normal, 1,19 cm³g⁻¹ y 1,32 cm³g⁻¹ respectivamente.

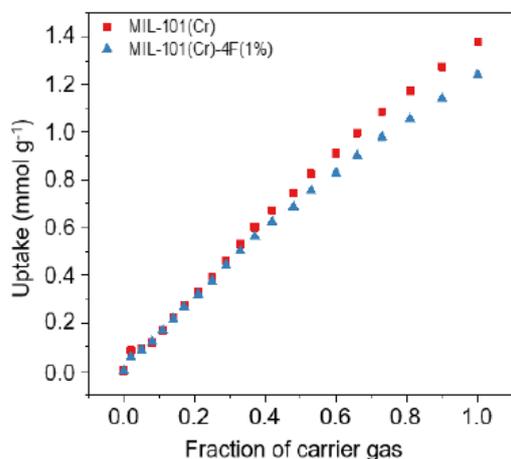


Figura 8. Isotermas de sorción de CO₂ a 25 °C y 1 bar de MIL-101(Cr) y MIL-101(Cr)- 4F(1%).

Los efectos de la sorción y difusión de CO₂ a baja concentración en condiciones húmedas en ambos materiales se midieron en el DVS Carbon. Después de la activación, las muestras se expusieron a un rango seleccionado de presión parcial de vapor de agua para simular la composición del gas de combustión (P/P⁰ de agua de 0, 0,05, 0,1, 0,15 y 0,2). Mientras esta presión se mantuvo constante, se introdujo un aumento gradual en la concentración de CO₂ a 0,05 bar, seguido de la desorción de CO₂ y, finalmente, la desorción de vapor de agua.

Los datos obtenidos de un experimento típico de coadsorción constan de cuatro pasos, dos para la adsorción y dos para la desorción (Figura 9).

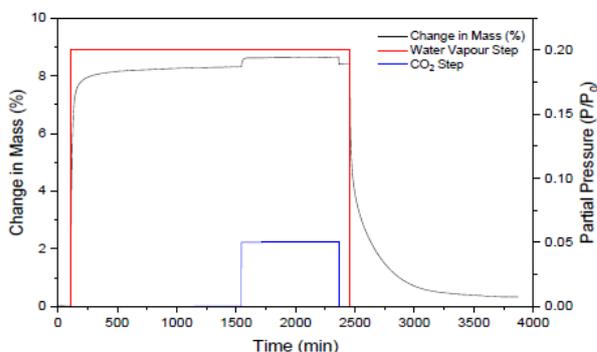


Figure 9. Adsorption and desorption mass change of MIL-101(Cr) exposed to a step change of water partial pressure of 0.2 P/P⁰, followed by a CO₂ partial pressure step change of 0.05 bar at 25 °C and 1 bar total pressure.

La Figura 10 muestra las capacidades de adsorción de CO₂ de ambos materiales a una concentración de CO₂ del 5,0% con diferentes cargas de agua de 0-0,2 o 0-20% de HR. Para el MIL-101(Cr) no modificado, la

presencia de agua es perjudicial para su rendimiento. La capacidad de CO₂ disminuye con cantidades crecientes de vapor de agua, hasta el valor más alto estudiado, donde su absorción disminuye alrededor de un 18% en comparación con el material seco. Por otro lado, el MIL-101 fluorado muestra una mejora en la absorción de CO₂ con cargas de agua bajas y moderadas, alcanzando una absorción máxima de aproximadamente 0,1 mmol g⁻¹ CO₂ a una presión parcial de 0,15. Sin embargo, a la presión parcial de 0,2, el material fluorado muestra una absorción de CO₂ un 22% menor en comparación con el material seco. Esto podría deberse a que durante la activación del material podrían perderse algunas moléculas de agua terminales. Sin embargo, la pérdida completa de estas moléculas de agua significa que también pueden perderse algunos sitios de adsorción de CO₂ favorecidos. Ahora bien, con valores de HR crecientes, algunos de estos sitios de adsorción se recuperan y, por lo tanto, la absorción mejora. Existe un valor de HR en el que la presencia de moléculas de H₂O ya no tiene un efecto positivo, y más bien, estas moléculas compiten por los sitios de adsorción con el CO₂. Este fenómeno ya se había descrito anteriormente para otros MOF, como MIL-100 y UiO-66.

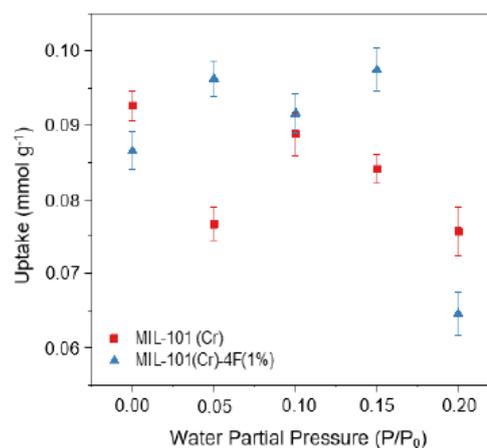


Figure 10. Carbon Dioxide (CO₂) adsorption capacities of MIL-101(Cr) and MIL-101(Cr)-4F(1%), CO₂ P/P⁰ = 0.05 at different water partial pressures (0, 0.05, 0.1, 0.15 and 0.2 P/P⁰) at 25 °C and 1 bar.

b) BTA en condiciones realistas

Hasta ahora, todos los experimentos de cosorción solo podían dar una indicación de la influencia de la presencia de un componente sobre otro. Para determinar por completo la adsorción individual de múltiples componentes, se requiere el uso de métodos Breakthrough.

Se preparó una columna de pellets de zeolita 13X moldeados, con una masa total de 0,26 g. El BTA Frontier está diseñado teniendo en cuenta pequeñas cantidades de muestra, lo que permite una rápida selección de materiales para condiciones de cosorción.

Después de la activación a 250 °C bajo un flujo de gas inerte, se pasó una mezcla de CO₂ y H₂O y un portador de nitrógeno que totalizaba 50 sccm a través de la columna, a concentraciones de

3,5% en volumen y 20% en humedad relativa, respectivamente. La concentración en la salida de la columna se monitoreó con los sensores BTA integrados, lo que produjo las curvas de ruptura de la Figura 11. Se realizó una medición en blanco utilizando helio como gas inerte y luego se restó de las curvas para eliminar las contribuciones del volumen muerto y la dispersión axial. La medición se repitió por triplicado, con activación entre cada ejecución.

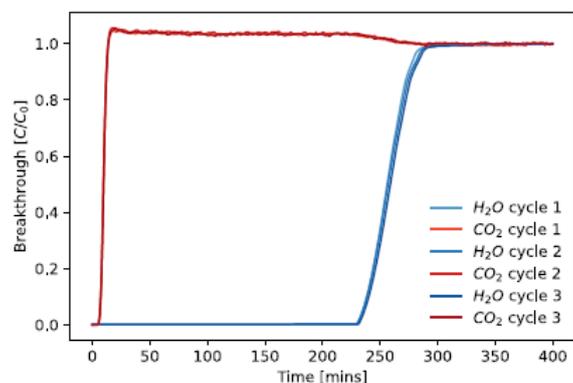


Figure 11. Three repeated breakthrough curves of CO₂ (3.5%) and H₂O (20% P/P) on a sample of Zeolite 13X.

Observamos una ruptura de CO₂ relativamente rápida, después de solo 15 minutos, y una ruptura de agua mucho más lenta, de casi 4 horas. Se observa un efecto de "enrollamiento" característico, ya que el agua reemplaza al CO₂ adsorbido, y conduce a una concentración de salida más alta que la de entrada mientras el frente de agua pasa a través de la columna. Se logra una repetibilidad casi perfecta en tres ciclos.

Para obtener la cantidad adsorbida de cada componente, las curvas se pueden integrar desde 0 a 300 minutos, cuando ambos componentes han roto, lo que produce un 0,55% en peso de CO₂ y un 23,4% en peso de agua.

El balance de masa anterior se realiza con dos suposiciones en mente. En primer lugar, que la caída de presión sobre la columna es insignificante, lo que se verifica utilizando sensores de presión integrados en el BTA Frontier. En segundo lugar, que el caudal de entrada es el mismo que el caudal de salida, una suposición válida en las bajas concentraciones de adsorbato utilizadas.

Los experimentos innovadores son un paso crucial para evaluar el rendimiento en el mundo real de los materiales de sorción de gas.

Conclusión

La captura, separación y almacenamiento de gas es de gran importancia para la energía y el medio ambiente, y un impulsor clave de la investigación en la industria y el mundo académico. Es importante conocer la amplia gama de técnicas de características de sorción disponibles y aplicar la técnica que sea más relevante para un material y una aplicación. Surface Measurement Systems ofrece una amplia gama de instrumentos que pueden funcionar en

una variedad de modos, como dinámico, estático, flujo atmosférico y presión reducida. Cada uno de estos diferentes modos de operación puede ofrecer beneficios únicos en el diseño de experimentos para modelar una amplia variedad de sistemas. Como líderes mundiales en ciencia de la sorción, nuestra experiencia y técnicas pueden ofrecer soluciones para cada paso del cribado de materiales para aplicaciones de captura de gas.

Índice de abstracts II Jornada Jóvenes Investigadores GEC 2024

Síntesis y Caracterización de Nuevos Materiales de Carbono

ORALES

1. Enhancing the carbonization efficiency of photopolymer-based monoliths 10

POSTER

1. Desarrollo de adsorbentes avanzados derivados de biomasa para captura de CO₂ en procesos BECCUS integrando el uso de herramientas de ciencia de datos 11
2. Síntesis de xerogeles de carbono dopados con cerio y hierro para su uso como electrodos en el proceso electro-Fenton en la degradación de contaminantes emergentes 12

Aplicaciones de los Materiales basados en Carbono en Generación y Almacenamiento de Energía

ORALES

1. Síntesis sostenible de materiales carbonosos dopados con heteroátomos y metales no preciosos a partir de residuos de biomasa para la generación de energía 13
2. Electrolito acuoso respetuoso con el medioambiente para su uso en supercondensadores 14
3. Materiales de carbono derivados de residuos vitivinícolas para la electro-reducción de CO₂ 15
4. Efecto de la temperatura en supercondensadores basados en carbón activado y electrolito neutro acuoso 16
5. Nanofibras de carbono funcionalizadas con fósforo como soporte catalítico en el hidrotreatmento de aceite de cocina usado 17
6. Funcionalización sostenible de materiales carbonosos con nitrógeno para su uso en supercondensadores 18
7. Oxidación controlada de nanofibras de carbono para catalizadores de ni-n-c para la reacción de evolución de oxígeno 19
8. Electrocatalizadores derivados de residuos de bodega aplicados a la reacción de reducción de oxígeno 20
9. Desarrollo de electrodos para supercondensadores de alta durabilidad mediante una estrategia de síntesis simple y sostenible 21

POSTER

1. Electrocatalizadores basados en MXenes y grafeno para aplicaciones de energía 22
2. Monolitos de carbón fabricados con impresión 3D como soporte de fase activa NiO-CeO₂ para la metanación de CO₂: efecto del sellado de la porosidad 23
3. Catalizadores bifuncionales basados en materiales carbonosos para la producción y almacenamiento de hidrógeno mediante el sistema ácido fórmico-bicarbonato 24

Aplicaciones Innovadoras de los Materiales basados en Carbono: Salud, Industria, Medioambiente y Sostenibilidad

ORALES

1. Sensores electroquímicos basados en nanotubos de carbono modificados con nanopartículas bimetalicas Au/Cu 25
2. Nanofibras de carbono funcionalizadas con fósforo como soportes de catalizadores de níquel para reacciones de hidroconversión 26
3. Reformado con vapor de líquidos de pirólisis empleando catalizadores de Ni soportados sobre carbones activados 27
4. Análisis de transferencia de masa en la biosorción de residuos textiles en fibras de ixtle *Agave Kerchovei* Lem 28
5. Catalizadores estructurados de base carbonosa para la producción de metanol mediante hidrogenación de CO₂ 29

Aplicaciones Innovadoras de los Materiales basados en Carbono: Salud, Industria, Medioambiente y Sostenibilidad

ORALES

6. Catalizadores fibrilares de base carbonosa con hierro disperso para la síntesis de Fischer-Tropsch	30
7. Alternativas sostenibles para la revalorización de residuos derivados de la industria agroalimentaria del cáñamo	31
8. Reducción electroquímica de CO ₂ a gas de síntesis utilizando geles de carbono-compuestos de grafeno verde como electrocatalizador libre de metales	32
9. Estudio de estabilidad de catalizadores ácidos de base carbonosa en la pirólisis rápida de residuos biomásicos	33
10. Catalizadores bimetálicos de base carbonosa para la reacción de Water Gas Shift	34

POSTER

1. Catalizadores Pd/C preparados a partir de residuos de biomasa para producción y almacenamiento de hidrógeno	35
2. Hidroformilación de 1-octeno utilizando catalizadores de Rh soportados sobre materiales de base carbonosa sostenibles	36
3. Transformación de productos derivados del alquitrán de hulla de bajo valor en carbones activados químicamente	37
4. Preparación de catalizadores fibrilares ácidos de base carbonosa para la deshidratación de metanol a olefinas	38
5. New trends in modelling of breakthrough curves to remove pollutants using adsorption on advanced monoliths geometries	39
6. Membranas de óxido de grafeno para la nanofiltración de fármacos	40
7. Carbono grafitico como soporte catalítico en la hidroisomerización selectiva de hexadecano	41
8. Efecto de distintos tratamientos químicos en la capacidad de biosorción de materiales carbonosos derivados de residuos de la industria del cáñamo	42
9. Sensores electroquímicos basados en materiales grafénicos para la detección de acetaminofeno en agua	43

Tecnologías para la Generación Sostenible de Energía

ORALES

1. Estudio de la tendencia a la aglomeración y la producción de CO de transportadores de oxígeno para Chemical Looping CO ₂ Splitting	44
--	----

POSTER

1. Advances in Petrochemical Transformation: catalytic cracking of heavy petroleum with innovative kaolin-based geo-catalysts	45
2. Análisis de las propiedades del hidrochar obtenido mediante carbonización y licuefacción hidrotermal de purín de cerdo	46
3. NewIronAge: el hierro como combustible en nuevos ciclos de almacenamiento de energía	47
4. Producción de hidrógeno mediante gasificación asistida con CaO de biomasa residual	48
5. Biocombustibles a partir de residuos industriales de biocolágeno del curtido vegetal mediante tecnologías de pirólisis siguiendo criterios de economía circular y sostenibilidad	49
6. Procesos de adsorción para la separación de hidrógeno de diferentes corrientes gaseosas en el contexto de una acería	50
7. Diseño y optimización de un sistema de reformado mejorado de CH ₄ con procesos Chemical Looping (SE-CLR)	51

Enhancing the carbonization efficiency of photopolymer-based monoliths

N. Corrochano^{*1}, M.I. Pariente¹, Y. Segura¹, R. Molina¹, F. Martínez^{1,2}, J.L. Diaz de Tuesta¹

¹ Grupo de Ingeniería Química y Ambiental

² Instituto de Tecnologías para la sostenibilidad; ESCET, Universidad Rey Juan Carlos, c/Tulipán s/n 28933 Móstoles, España

* noelia.cguijarro@urjc.es

Palabras clave: response surface methodology; pyrolysis; thermogravimetric analysis

Carbon materials play a key role in various fields due to their properties and versatility, and are commonly used in powdered, pellet or bead form. 3D-carbon-based materials can overcome the disadvantages that other forms present, improving electrical conductivity, fluidization, among others [1]. Photopolymer monoliths (PMs), synthesized by stereolithography 3D-printing, can be transformed into carbon monoliths employing a well-studied carbonization process that allows to preserve their structure [2]. In this work, the carbonization of PMs is deeply studied and optimized through a design of experiments (DoE) to maximize carbon monolith yield and size, while achieving high BET specific surface area (S_{BET}). The PMs (prepared from a tailored resin [1-2]) were synthesized by a DLP 3D printer and subsequently carbonized using thermogravimetric analysis (TGA). A DoE for two factors (11 runs) was used to optimize the oxidation temperature ($T_{OX} = 200\text{--}400\text{ }^{\circ}\text{C}$) and heating rate ($HR = 0.5\text{--}6.5\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{min}$) of the carbonization process, which involves two stages: 1) oxidation pretreatment with air at T_{OX} and 2) pyrolysis under N_2 flow up to $850\text{ }^{\circ}\text{C}$. Yields at T_{OX} and $850\text{ }^{\circ}\text{C}$ were determined by TGA and a digital microscope was used to measure the monolith sizes (diameter and height) (Fig. 1 A-C). The data results were successfully fitted using a second order interaction model, providing $R^2_{adj} > 0.9$, and the results suggested that the optimal conditions to obtain high yields and sizes are at $T_{OX} = 400\text{ }^{\circ}\text{C}$ and $HR = 0.5\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{min}$ (Fig. 1 D). In addition, “run 7” ($T_{OX} = 400\text{ }^{\circ}\text{C}$ and $HR = 3.5\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{min}$) has provided the highest S_{BET} , reaching $1175\text{ m}^2/\text{g}$.

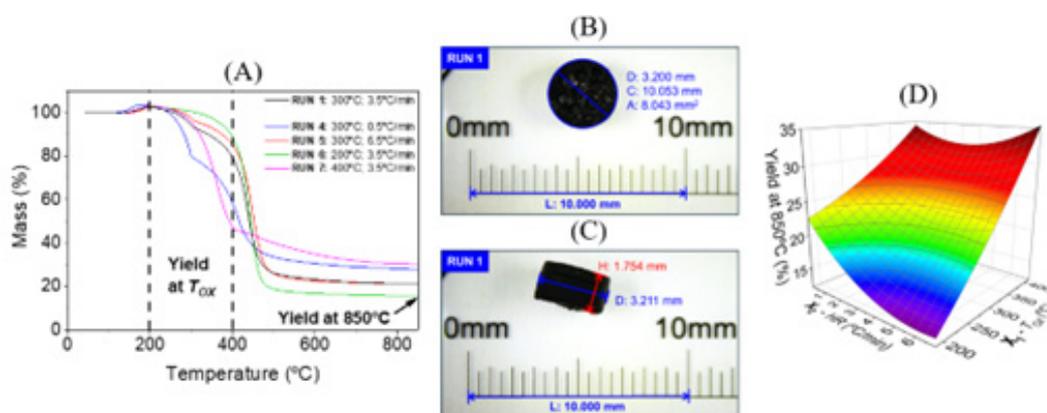


Figure 1. (A) TGA for CCD runs; (B) diameter and (C) height of carbon monolith for “run 1”; and (D) response surface of yield.

Acknowledgments

N. Corrochano and J. L. Diaz de Tuesta acknowledge the financial support through the program of Atracción al Talento of Comunidad de Madrid (Spain) for the grant and research project 2022-T1/AMB-23946.

Referencias

[1] Zafaneli, L. F. A. S.; Henrique, A.; Stedinger, H.; Diaz de Tuesta, J. L.; Gläsel, J.; Rodrigues, A. E.; Gomes, H. T.; Etzold, B. J. M.; Silva, J. A. C., “3D-printed activated carbon for post-combustion CO_2 capture”, *Microporous Mesoporous Mater.* 335 (2022) 111818.

[2] Stedinger, H.; Esposito, A.; Brunnengräber, K.; Gläsel, J.; Etzold, B. J. M., “Activated Carbon in the Third Dimension—3D Printing of a Tuned Porous Carbon”, *Adv Sci* 6 (2019) 1901340.

Desarrollo de adsorbentes avanzados derivados de biomasa para captura de CO₂ en procesos BECCUS integrando el uso de herramientas de ciencia de datos

David Fernández*, Covadonga Pevida, M^a Victoria Gil

Instituto de Ciencia y Tecnología del Carbono (INCAR-CSIC)

* david.fernandez@incar.csic.es

Palabras clave: captura de CO₂, machine learning, carbones porosos jerárquicos, MOF@Biomass

Antecedentes y estado actual de la temática

La descarbonización del sistema energético global es vital para mitigar el cambio climático. En este contexto, las tecnologías de captura, utilización y almacenamiento de carbono (CCUS) juegan un papel fundamental en la reducción de emisiones. Entre las tecnologías CCUS, la combinación de bioenergía con captura de carbono (BECCUS) es crucial para lograr emisiones netas negativas. Este proyecto se enfoca en la captura de CO₂ de corrientes gaseosas provenientes de la biomasa mediante adsorción, utilizando materiales derivados de biomasa, como carbones porosos jerárquicos (HPC) e híbridos MOFs adheridos a una superficie de origen biomásico (MOF@biomasa), con el objetivo de lograr propiedades mejoradas en adsorción de CO₂ con respecto al estado del arte [1]. La selección de estos materiales como candidatos con buen rendimiento en este tipo de procesos se debe a sus propiedades texturales customizables, elevada área superficial, adsorción selectiva de CO₂, hidrofobicidad, estabilidad térmica y fácil regeneración [2]. La utilización de carbones porosos jerárquicos (HPC) han demostrado ser una opción muy prometedora para la adsorción selectiva de CO₂ en aplicaciones prácticas [3]. Por otra parte, estudios preliminares muestran que los MOF@Biomass presentan ventajas frente a la versión aislada (MOF) y el material biomásico original en términos de adsorción [4].

En este trabajo se presenta un resumen del proyecto de la tesis doctoral que acabo de iniciar y cuyo objetivo principal el desarrollo de adsorbentes derivados de biomasa para la captura de CO₂ en procesos de producción de biohidrógeno y biometano, dentro del contexto BECCUS. Los objetivos específicos abarcan desde la síntesis de esos materiales avanzados hasta el análisis de ciclo de vida del proceso de captura, mientras en paralelo se lleva a cabo la integración de herramientas de machine learning para optimizar la síntesis de estos materiales.

Referencias

- [1] S. Li, X. Yuan, S. Deng, L. Zhao, and K. B. Lee, "A review on biomass-derived CO₂ adsorption capture: Adsorbent, adsorber, adsorption, and advice," *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 152, p. 111708, Dec. 2021, doi: [10.1016/j.rser.2021.111708](https://doi.org/10.1016/j.rser.2021.111708).
- [2] R. Chakraborty, V. K. M. Pradhan, and A. K. Nayak, "Recent advancement of biomass-derived porous carbon-based materials for energy and environmental remediation applications," *J Mater Chem A Mater*, vol. 10, no. 13, pp. 6965–7005, 2022, doi: [10.1039/D1TA10269A](https://doi.org/10.1039/D1TA10269A).
- [3] S. Dutta, A. Bhaumik, and K. C.-W. Wu, "Hierarchically porous carbon derived from polymers and biomass: effect of interconnected pores on energy applications," *Energy Environ. Sci.*, vol. 7, no. 11, pp. 3574–3592, 2014, doi: [10.1039/C4EE01075B](https://doi.org/10.1039/C4EE01075B).
- [4] B. F. Rivadeneira-Mendoza et al., "MOF@biomass hybrids: Trends on advanced functional materials for adsorption," *Environ Res*, vol. 216, p. 114424, Jan. 2023, doi: [10.1016/j.envres.2022.114424](https://doi.org/10.1016/j.envres.2022.114424).

Síntesis de xerogeles de carbono dopados con cerio y hierro para su uso como electrodos en el proceso electro-Fenton en la degradación de contaminantes emergentes

Karina Mota-Resendiz^{*1,2}, Adriana Moral-Rodríguez², Agustín Francisco Pérez-Cadenas², Francisco Carrasco-Marín², Raúl Ocampo-Pérez¹, Esther Bailón-García²

¹ *Materiales Polifuncionales Basados en Carbono, Departamento de Química Inorgánica - Unidad de Excelencia de Química Aplicada a Biomedicina y Medioambiente - Universidad de Granada (UEQ-UGR), 18071 Granada, Spain*

² *Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Dr. M. Nava 6, San Luis Potosí SLP, 78210, México*

* esme.mota.resendiz@gmail.com

La contaminación del agua es uno de los mayores desafíos ambientales del siglo XXI, afectando gravemente los ecosistemas, la salud pública y las economías globales. Este problema se agrava con la presencia de contaminantes emergentes (CE), sustancias que aún no están reguladas y cuyos efectos sobre la salud y el medio ambiente no se conocen por completo. Entre los CE se encuentran productos farmacéuticos, cosméticos, pesticidas y hormonas, los cuales no son eliminados de manera eficiente por los tratamientos convencionales, lo que intensifica la urgencia de desarrollar tecnologías más avanzadas para su eliminación.

Entre las tecnologías más prometedoras destacan los Procesos de Oxidación Avanzada (POA), que se basan en el alto poder oxidativo de los radicales hidroxilo ($\cdot\text{OH}$) para la eliminación eficiente de contaminantes orgánicos. En particular, el proceso electro-Fenton (EF) heterogéneo es un proceso atractivo, ya que el H_2O_2 se genera in situ mediante la reducción electroquímica de oxígeno (ORR) y se activa simultáneamente en el catalizador Fenton para producir radicales $\cdot\text{OH}$. Idealmente, ambos procesos deben ocurrir en el mismo catalizador. La ORR puede seguir dos rutas: una de $4e^-$, que genera H_2O , o una de $2e^-$, que produce H_2O_2 . La selectividad del proceso depende de la interacción del O_2 con el centro activo del catalizador; una interacción demasiado fuerte favorece la generación de H_2O en lugar de H_2O_2 . La síntesis de catalizadores bifuncionales para el proceso EF es un reto, ya que los sitios activos para Fenton, comúnmente basados en metales de transición, catalizan la ORR a través de la ruta de $4e^-$. Por ello, es necesario sintetizar materiales que contengan metales tipo Fenton pero que moderen su interacción con el oxígeno para que la ORR ocurra a través de la ruta de dos electrones [1]. Se ha observado que propiedades como la dispersión del metal, el grado de grafitización/conductividad y las propiedades de textura de los materiales de carbono afectan significativamente la interacción del oxígeno con los sitios activos, y, en consecuencia, el rendimiento de la ORR. En este trabajo, se propone la síntesis de esferas de xerogel de carbono dopadas con cerio (Ce) y hierro (Fe) por una ruta hidrotermal, con el objetivo de favorecer la ruta de dos electrones en la electro reducción de oxígeno hacia H_2O_2 y su aplicación como electrodos bifuncionales en la degradación de contaminantes emergentes.

Referencias

[1] N. Oturan and M. A. Oturan, "Electro-fenton process: Background, new developments, and applications," in *Electrochemical Water and Wastewater Treatment*, Elsevier, 2018, pp. 193–221. doi: [10.1016/B978-0-12-813160-2.00008-08](https://doi.org/10.1016/B978-0-12-813160-2.00008-08).

Síntesis sostenible de materiales carbonosos dopados con heteroátomos y metales no preciosos a partir de residuos de biomasa para la generación de energía

Álvarez-Parejo, S.*¹, Alemany-Molina, G.¹, Morallón, E.², Cazorla-Amorós, D.¹

¹ Departamento de Química Inorgánica e Instituto de Materiales, Universidad de Alicante, Ap. 99, Alicante, E-03080, Spain

² Departamento de Química-Física e Instituto de Materiales, Universidad de Alicante, Ap. 99, Alicante, E-03080, Spain

* sap46@gcloud.ua.es

Palabras clave: carbono dopado con nitrógeno, electrocatalizador, hierro, ORR

La sustitución de los combustibles fósiles por energías renovables es necesaria para mitigar los efectos del cambio climático, producido principalmente por la emisión de CO₂ a la atmósfera. Dada la intermitencia de las energías renovables, es necesario el desarrollo de dispositivos de almacenamiento de energía eficientes para su implementación. Entre las tecnologías de almacenamiento y generación de energía, los dispositivos electroquímicos son ampliamente estudiados debido a su versatilidad y eficiencia. Entre ellos, las baterías, supercondensadores, electrolizadores y pilas de combustible están en continua investigación y desarrollo para mejorar su capacidad de almacenar o producir energía sin comprometer la potencia y/o estabilidad. En la mayoría de estos dispositivos, es necesaria la utilización de un electrocatalizador debido a la lenta velocidad de las reacciones involucradas, y estos catalizadores suelen estar basados en metales preciosos soportados en materiales de carbono, lo que dificulta la implementación de la tecnología. En este sentido, nuevos catalizadores, ya sea basados en materiales de carbono sin metales o en catalizadores basados en metales no preciosos, son objeto de intensa investigación, buscando materiales que puedan sustituir a los metales preciosos y que utilicen procesos más ecológicos y sostenibles [1].

Los materiales de carbono dopados con nitrógeno y los metales no preciosos han demostrado su eficiencia electrocatalítica y su capacidad para ser utilizados en múltiples campos científicos, técnicos e industriales. Estos materiales emergen como una alternativa prometedora a los electrocatalizadores basados en platino utilizados en la Reacción de Reducción de Oxígeno (ORR, por sus siglas en inglés) [1]. La presencia de nitrógeno aumenta la selectividad de los materiales de carbono hacia una vía de 4 electrones, un mecanismo termodinámicamente más favorable y más deseable, y permite la interacción con el metal incorporado, lo que a su vez promueve la formación de nuevos sitios activos [2-4]. En este estudio, se prepararon catalizadores con diferentes cantidades de material carbonoso (derivado de un residuo de biomasa), precursor de nitrógeno y precursor metálico, que en este caso fueron dicianodiamida y oxalato de hierro respectivamente. Se utilizó cáscara de almendra molida (AS) como precursor de materiales de carbono, y los resultados se compararon con catalizadores preparados con carbón activado de alta porosidad. Para la síntesis, se realizaron un tratamiento mecanoquímico y un tratamiento térmico posterior a diferentes temperaturas, siendo este proceso más sencillo y ecológico que los métodos convencionales solvotermales típicamente utilizados.

La caracterización fisicoquímica y electroquímica ha demostrado que realizar un tratamiento mecanoquímico antes del programa de temperatura permite la incorporación de los precursores en el material de carbono con una mejor distribución de Fe, y que las condiciones de humedad y la duración de la molienda son factores clave en el resultado de las muestras. Los materiales preparados muestran propiedades electrocatalíticas interesantes, siendo una metodología que podría optimizarse para su futura ampliación.

Agradecimientos

Este trabajo es parte del proyecto de I+D+i PID2021-123079OB-I00 financiado por MCIN/AEI/10.13039/501100011033 y por FEDER, UE.

Referencias

- [1] Alemany-Molina, G.; Quílez-Bermejo, J.; Navlani-García, M.; Morallón, E.; Cazorla-Amorós, D., "Efficient and cost-effective electrocatalysts based on low content transition metals highly dispersed on C₃N₄/super-activated carbon composites", Carbon 196 (2022) 378-390.
- [2] Zhang, L.; Jiang, S.; Ma, W.; Zhou, Z., "Oxygen reduction reaction on Pt-based electrocatalysts: Four-electron vs. two-electron pathway", Chinese Journal of Catalysis 43 (2022) 1433-1443.
- [3] Trigueros-Sancho, A.; Martínez-Sánchez, B.; Cazorla-Amorós, D.; Morallón, E., "One-step synthesis of MN₄ molecular electrocatalysts assembled on different nanocarbon architectures for efficient oxygen reduction", Carbon 211 (2023).
- [4] Wu, J.; Yang, H., "Platinum-based oxygen reduction electrocatalysts", Account of Chemical research 46 (2013) 1848-1857.

Electrolito acuoso respetuoso con el medioambiente para su uso en supercondensadores

L.Figueroes Fernández^{*1}, C. D. Jaimes-Paez², D. Salinas-Torres¹, D. Cazorla-Amorós¹, E. Morallón²

¹ Departamento de Química Inorgánica, Instituto Universitario de Materiales de Alicante (IUMA), Universidad de Alicante, Ap, 99, 03080 Alicante, España

² Departamento de Química Física, Instituto Universitario de Materiales de Alicante (IUMA), Universidad de Alicante, Ap, 99, 03080 Alicante, España

* laiafigueres00@gmail.com

Palabras clave: supercondensador, electrolito acuoso, carbón activado, almacenamiento de energía

Actualmente, nuestra sociedad depende en gran medida de la explotación de los combustibles fósiles, que contribuyen significativamente al cambio climático. Para solucionar este problema, es crucial implementar fuentes de energía más sostenibles y limpias, como las fuentes de energía renovables que reducirían dichas emisiones. Sin embargo, estas dependen de las condiciones climáticas. Para atenuar esta intermitencia, es necesario desarrollar sistemas de almacenamiento de energía. En este punto, los supercondensadores son firmes candidatos para su uso en sistemas de almacenamiento de energía, y destacan por su alta densidad de potencia, larga vida útil y rápida respuesta a cambios en el voltaje. A pesar de sus ventajas, presentan una densidad de energía baja, lo que hace necesaria la optimización de los materiales usados como electrodos, o bien, maximizar la ventana de potencial de trabajo haciendo uso de una configuración asimétrica en los supercondensadores, que mejoraría la densidad de energía.

Esta investigación se centra en explorar el uso de un carbón activado comercial como material de electrodo y en estudiar el rendimiento de las configuraciones simétricas y asimétricas, utilizando un electrolito acuoso basado en carbonato de sodio. El comportamiento electroquímico de los dispositivos se llevó a cabo mediante ensayos de voltametría cíclica y cronopotenciometría. Finalmente, se realizó una prueba de estabilidad que consistió en ciclos de carga-descarga a altos voltajes. Los resultados mostraron que el supercondensador asimétrico mostró mejor rendimiento que el simétrico, tanto en términos de capacidad como de estabilidad, manteniendo una alta capacidad gravimétrica tras 20000 ciclos de carga-descarga en condiciones galvanostáticas.

Agradecimientos

Este estudio forma parte del programa de materiales avanzados financiado por MCIN con fondos de la Unión Europea NextGenerationEU (PRTR-C17.I1) y por la Generalitat Valenciana (MFA/2022/001). DST agradece al proyecto CIDEGENT 2023 (Plan GenT) financiado por la Generalitat Valenciana (CIDEXG/2023/2).

Referencias

- ^[1] Salinas-Torres, D.; Ruiz-Rosas, R.; Morallón, E.; Cazorla-Amorós, D., "Strategies to Enhance the Performance of Electrochemical Capacitors Based on Carbon Materials", *Frontiers in Materials*, vol. 6 (2019).
- ^[2] Liu, J.; Wang, J.; Xu, C.; Jiang, H.; Li, C.; Zhang, L.; Lin, J.; Shen, Z. X., "Advanced Energy Storage Devices: Basic Principles, Analytical Methods, and Rational Materials Design", *Advanced Science*, vol. 5 (1) (2017).
- ^[3] Piñero-Prado, I.; Salinas-Torres, D.; Ruiz-Rosas, R.; Morallón, E.; Cazorla-Amorós, D., "Design of activated carbon/activated carbon asymmetric capacitors", *Frontiers in Materials*, vol. 3 (2016).

Materiales de carbono derivados de residuos vitivinícolas para la electro-reducción de CO₂

A. C. Giménez-Rubio*, I. Vela, M. Gutiérrez-Roa, M. J. Lázaro, S. Pérez-Rodríguez

Instituto de Carboquímica (CSIC), Miguel Luesma Castán 4, 50018 Zaragoza, España

* agimenez@icb.csic.es

Palabras clave: valorización de CO₂, residuos vitivinícolas, materiales de carbono, catalizadores libres de metal, electrodo de disco anillo rotatorio

La electro-reducción de CO₂ (CO₂RR) consiste en la conversión de CO₂ a otros compuestos carbonosos utilizando electricidad procedente, idealmente, de fuentes renovables. Esta tecnología no solo ofrece una vía para almacenar energía, sino que también contribuye a reducir la concentración de CO₂ atmosférico. No obstante, la CO₂RR es una reacción compleja debido a que el CO₂ es una molécula muy estable y la selectividad de la reacción hacia productos concretos es difícil de controlar. Por ello, su desarrollo requiere el uso de catalizadores avanzados que optimicen tanto la actividad como la selectividad de la reacción.

Tradicionalmente, los catalizadores basados en metales han sido los más investigados para la CO₂RR. En los últimos años, se han explorado materiales de carbono libres de metal como una alternativa prometedora y de bajo coste. Se ha comprobado que grupos funcionales de N, en especial el piridínico, son capaces de favorecer la conversión de CO₂ a CO [1]. Otros estudios sugieren que la porosidad de los catalizadores también influye en su desempeño electroquímico [2]. Como precursor de carbono, se puede emplear biomasa, una materia prima abundante, económica y renovable, lo que contribuye a una tecnología más ecológica y accesible [3].

En este trabajo se han preparado distintos catalizadores a partir de residuos vitivinícolas y urea variando las estrategias de dopado con nitrógeno. La composición de la muestra, estructura y textura se han estudiado mediante diferentes técnicas analíticas. El comportamiento electro-químico fue evaluado en una celda de tres electrodos, empleando una disolución acuosa de 0,1M KHCO₃ como electrolito y un electrodo de disco anillo rotatorio como electrodo de trabajo. Los resultados obtenidos muestran la eficacia de los catalizadores en la producción de CO y la influencia de las rutas de síntesis sobre su actividad para la CO₂RR.

Agradecimientos

Los autores desean agradecer a MICIU/AEI/10.13039/501100011033 y la Unión Europea NextGenerationEU/PRTR la financiación recibida con el proyecto de referencia PID2020-115848RB-C21 y al Gobierno de Aragón por la financiación al proyecto LMP253_21 y al grupo T06-23R. A.C. Giménez-Rubio desea agradecer al CSIC la concesión de su beca JAE Intro ICU 2021-ICB-04. S. Pérez-Rodríguez agradece también al MICIU/AEI/10.13039/501100011033 la concesión de su contrato Juan de la Cierva-Incorporación IJC2019-041874-I.

Referencias

- [1] Liu, S.; Yang, H.; Huang, X.; Liu, L.; Cai, W.; Gao, J.; Li, X.; Zhang, T.; Huang, Y.; Liu, B., Identifying Active Sites of Nitrogen-Doped Carbon Materials for the CO₂ Reduction Reaction, *Advanced Functional Materials* 28 (2018) 1800499.
- [2] Fu, S.; Li, M.; de Jong, W.; Kortlever, R., Tuning the Properties of N Doped Biochar for Selective CO₂ Electroreduction to CO, *ACS Catalysis* 13 (2023) 10309–10323.
- [3] Lia, F.; Xuec, M.; Knowles, G.P.; Chena, L.; MacFarlane, D. R.; Zhang, J., Porous nitrogen-doped carbon derived from biomass for electrocatalytic reduction of CO to CO₂, *Electrochimica Acta* 245 (2017) 561–568.

Efecto de la temperatura en supercondensadores basados en carbón activado y electrolito neutro acuoso

R. Ligeró Peralta*¹, C. D. Jaimes-Paez², D. Salinas-Torres¹, E. Morallón², D. Cazorla-Amorós¹

¹ Departamento de Química Inorgánica, Instituto Universitario de Materiales de Alicante (IUMA), Universidad de Alicante, Ap, 99, 03080 Alicante, España

² Departamento de Química Física, Instituto Universitario de Materiales de Alicante (IUMA), Universidad de Alicante, Ap, 99, 03080 Alicante, España

* raulligero@hotmail.com

Palabras clave: supercondensadores, carbón activado, temperatura, electrolito neutro

Los supercondensadores son sistemas de almacenamiento de energía que se basan en la formación de una doble capa eléctrica a partir de la adsorción de iones en la interfase electrodo y electrolito [1]. En los supercondensadores hay algunos parámetros tales como la solvatación iónica, conductividad iónica, viscosidad, coeficiente de difusión o la adsorción de iones [2-5], los cuales dependen directamente de la temperatura, y estos, a su vez, están relacionados indirectamente con la capacidad, energía y potencia del condensador.

El efecto de la temperatura se evaluó en las propiedades electroquímicas de un supercondensador simétrico basado en un carbón activado comercial y electrolito Na_2SO_4 0,5M. En la preparación del electrodo se usó carbón activado, negro de acetileno y teflón en proporción 85/10/5 (% en peso), respectivamente. La caracterización fisicoquímica se realizó mediante isotermas de adsorción de N_2 y experimentos de desorción a temperatura programada. La caracterización electroquímica se realizó mediante voltametría cíclica, cronopotenciometría y espectroscopia de impedancia electroquímica a diferentes temperaturas. Así, al aumentar la temperatura disminuye la viscosidad, mientras que, la difusividad de las especies, la conductividad iónica y la capacidad aumentan. Los resultados preliminares mostraron un aumento de 41 mV en el voltaje máximo a circuito abierto al cambio de temperatura. Esto sugiere que la energía térmica se podría recolectar con éxito en energía eléctrica.

Agradecimientos

Este estudio forma parte del programa de materiales avanzados financiado por MCIN con fondos de la Unión Europea NextGenerationEU (PRTR-C17.11) y por la Generalitat Valenciana (MFA/2022/001). DST agradece al proyecto CIDEAGENT 2023 (Plan GenT) financiado por la Generalitat Valenciana (CIDEXG/2023/2)

Referencias

- [1] Piñeiro-Prado, I.; Salinas-Torres, D.; Ruiz-Rosas, R.; Morallón, E.; and Cazorla-Amorós, D., "Design of activated carbon/activated carbon asymmetric capacitors", *Frontiers in Materials*, 3, 2016.
- [2] Marliacy, P.; Solimando, R.; Bouroukba, M.; and Schuffenecker, L., "Thermodynamics of crystallization of sodium sulfate decahydrate in $\text{H}_2\text{O}-\text{NaCl}-\text{Na}_2\text{SO}_4$: application to $\text{Na}_2\text{SO}_4 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$ -based latent heat storage materials", *Thermochimica Acta*, 344, 2000, 85–94.
- [3] Sharygin, A. V.; Mokbel, I.; Xiao, C.; and Wood, R. H., "Tests of equations for the electrical conductance of electrolyte mixtures: Measurements of association of NaCl (Aq) and Na_2SO_4 (Aq) at high temperatures", *Journal of Physical Chemistry B*, 105, 2001, 229–237.
- [4] Laliberté, M., "Model for calculating the viscosity of aqueous solutions," *Journal of Chemical and Engineering Data*, 52, 2007, 321–335.
- [5] Xiong, G.; Kundu, A.; and Fisher, T. S., "Thermal effects in supercapacitors", Springer, 2015, 71-114.

Nanofibras de carbono funcionalizadas con fósforo como soporte catalítico en el hidrotratamiento de aceite de cocina usado

A. Muñoz-Arjona*, A. Ayala-Cortés, C. Di Stasi, D. Torres, J. L. Pinilla, I. Suelves

Instituto de Carboquímica, CSIC. C/Miguel Luesma Castán 4, 50018, Zaragoza, España

* amunoz@icb.csic.es

Palabras clave: hidrotratamiento de aceite de cocina usado, nanofibras de carbono, funcionalización con fósforo, isomerización

El biodiésel, obtenido por transesterificación de biomasa oleaginosa, se usa como sustituto del diésel, pero su calidad es limitada por la generación de subproductos y baja estabilidad. El hidrotratamiento (HT) es una alternativa que, mediante hidrodesoxigenación (HDO) y decarboxilación (DCO), produce diésel verde (HC lineales C₁₅-C₁₈). Con la isomerización, se obtienen combustibles de aviación, mejorando el punto de congelación, estabilidad térmica y rendimiento [1]. Los aceites de cocina usados (ACU) son una materia prima atractiva para estos biocombustibles. En este trabajo se ha estudiado el efecto de catalizadores basados en Mo y P para la generación de fracciones de HC de diésel verde y combustible de aviación.

Las nanofibras de carbono (NFC) se impregnaron con ácido fosfórico, se secaron y calcinaron a 750 °C. Se prepararon catalizadores de Mo₂C (Mo: 10, 20, 30% peso) sobre NFC impregnadas con P mediante impregnación húmeda incipiente, secado y carborreducción con H₂ a 750 °C. El estudio de los catalizadores en la HT de ACU se realizó en un reactor batch de 100 mL, bajo 70 bar H₂, 350 °C y 3 horas, para convertir 2,5 mL ACU en decano como solvente.

El contenido de P en los catalizadores fue del 4%. Según el análisis XRD (Figura 1), el tamaño del dominio cristalino de Mo₂C disminuyó con la carga de Mo: 16,1, 10 y 7,8 nm para 10%, 20% y 30% de Mo, respectivamente. Se compararon catalizadores de Mo con y sin P, obteniéndose una conversión del 70% en ambos casos (Figura 2). Con Mo se obtuvieron principalmente HC lineales del rango C₁₅-C₁₈, mientras que con P disminuyó la cantidad de HC lineales, aumentando la generación de isómeros (4-6% en peso).

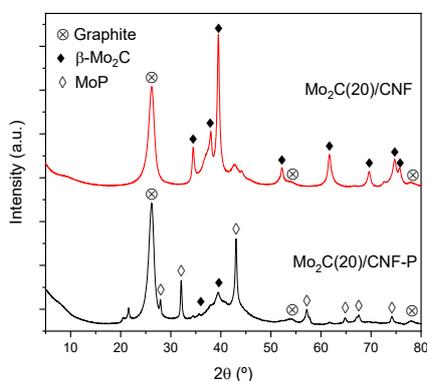


Figura 1. Difractogramas de los catalizadores.

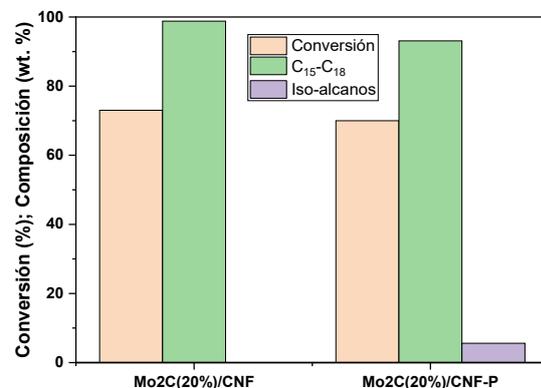


Figura 2. Productos líquidos y conversión.

Agradecimientos

Los autores agradecen a MCIN/AEI/10.13039/501100011033 por la financiación recibida a través del proyecto PID2020-115053RBI00. A.M. agradece a MCIN/AEI/10.13039/501100011033 y el Fondo Social Europeo Plus (ESF+) por su contrato predoctoral (PRE2021-098829).

Referencias

[1] Lukovits, I., Fodor, J., Gömör, Á., István, K., Keresztury, G., & Kótai, L. (2006). Alkane isomers: presence in petroleum ether and complexity. SAR and QSAR in Environmental Research, 17(3), 323-335.

Funcionalización sostenible de materiales carbonosos con nitrógeno para su uso en supercondensadores

J. Sánchez Carrasco*¹, J. Chaparro Garnica¹, D. Salinas-Torres¹, E. Morallón², D. Cazorla-Amorós¹

¹ Departamento de Química Inorgánica e Instituto Universitario de Materiales, Universidad de Alicante, Apartado 99, 03080, Alicante, España

² Departamento de Química Física e Instituto Universitario de Materiales. Apartado 99, 03080 Alicante

*jorgesanchezcarrasco1@gmail.com

Palabras clave: supercondensador, carbón activado, funcionalización, análisis de ciclo de vida

Los supercondensadores han suscitado mucho interés en el almacenamiento de energía debido a su alta eficiencia y larga vida útil, lo que los convierte en una alternativa prometedora a los desafíos energéticos actuales. Sin embargo, los procesos de activación y purificación necesarios para estabilizar el carbón activado elevan el coste de estos dispositivos, así como la huella medioambiental. Es crucial utilizar métodos sostenibles para producir materiales carbonosos para esta aplicación que reduzcan el coste y eviten el uso de reactivos nocivos. Un método eficaz es la preparación de carbones activados a partir de biomasa y la modificación de su química superficial para mejorar su rendimiento, siendo la funcionalización con nitrógeno una técnica efectiva para aumentar su estabilidad electroquímica [1].

Esta investigación se centró en la modificación de la química superficial de un carbón activado comercial utilizando reacciones orgánicas en condiciones experimentales suaves y disolvente acuoso. El objetivo fue reducir el uso de compuestos orgánicos, empleando métodos de síntesis con un menor impacto ambiental, los cuales se evaluaron mediante un análisis de ciclo de vida para determinar si los procesos alternativos reducen los impactos ambientales [2]. Se han usado diferentes rutas de síntesis utilizando disolventes acuosos y sales inorgánicas, generando grupos funcionales nitrogenados similares a los obtenidos con los reactivos orgánicos. La caracterización electroquímica confirmó la mejora en el rendimiento de los materiales carbonosos funcionalizados, siendo comparable a la obtenida para un carbón activado comercial que se usa en supercondensadores. Las pruebas de estabilidad para supercondensadores basados en los materiales funcionalizados mostraron una mejora en comparación con el material comercial no funcionalizado. El análisis del ciclo de vida demostró una reducción del impacto ambiental para los procesos alternativos.

Agradecimientos

Los autores agradecen al proyecto PLEC2023-010216, financiado por MICIU/AEI /10.13039/501100011033. DST agradece al proyecto CIDEAGENT 2023 (Plan GenT) financiado por la Generalitat Valenciana (CIDEXG/2023/2).

Referencias

[1] Chaparro-Garnica, J.; Salinas-Torres, D.; Mostazo-López, M. J.; Morallón, E.; Cazorla-Amorós, D. Biomass waste conversion into low-cost carbon-based materials for supercapacitors: A sustainable approach for the energy scenario. *J. Electroanal. Chem.* 880 (2021) 114899.

[2] Chaparro-Garnica, J.; Guiton, M.; Salinas-Torres, D.; Morallón, E.; Benetto, E.; Cazorla-Amorós, D. Life Cycle assessment of biorefinery technology producing activated carbon and levulinic acid. *J. Clean. Prod.* 380 (2022) 135098.

Oxidación controlada de nanofibras de carbono para catalizadores de Ni-N-C para la reacción de evolución de oxígeno

C. Serrano-Alcalde*, A.A. Loreto, S. Pérez-Rodríguez, M.J. Lázaro, D. Sebastián

Instituto de Carboquímica (CSIC), Miguel Luesma Castán 4, 50018 Zaragoza, España

* cserrano@icb.csic.es

Palabras clave: electrólisis con membrana de intercambio aniónico, nanofibras de carbono, evolución de oxígeno

El mundo se encuentra en plena transición hacia un modelo energético más sostenible y respetuoso con el medioambiente. En este contexto, el hidrógeno emerge como un vector energético clave para lograr dicha transformación. Actualmente, la tecnología más desarrollada para la producción de hidrógeno verde es la electrólisis del agua, aunque su viabilidad económica y técnica depende en gran medida del uso de catalizadores que optimicen su eficiencia. Entre las tecnologías de electrólisis, este estudio se centra en la electrólisis con membrana de intercambio aniónico (AEM), una alternativa con gran potencial, ya que combina las ventajas de la electrólisis alcalina (AE) y la de membrana de intercambio protónico (PEM). Sin embargo, para mejorar la viabilidad de esta tecnología, es fundamental abordar las limitaciones asociadas a la reacción de evolución de oxígeno (OER), cuya cinética es más lenta que la formación de hidrógeno [1].

Este estudio se centra en la investigación de catalizadores de níquel disperso a nivel atómico en una matriz de carbono (nanofibras) dopada con nitrógeno (Ni-N-C) para la reacción de evolución de oxígeno (OER), con el objetivo de aumentar la actividad a dicha semi-reacción. La innovación de esta investigación radica en la modificación química mediante la oxidación con peróxido de hidrógeno de una matriz de nanofibras de carbono, buscando aumentar la cantidad de sitios activos y así mejorar el rendimiento en la OER [2]. Las nanofibras de carbono fueron seleccionadas debido a su excelente conductividad y estabilidad, proporcionada por su estructura interna grafitica. La principal conclusión es que resulta crucial introducir rugosidades y/o defectos en la superficie de las nanofibras para alojar sitios activos sin comprometer la estructura filamentosa, y la oxidación parcial es una buena estrategia para ello.

Agradecimientos

Estos resultados son parte del proyecto de I+D+i de referencia PID2020-115848RB-C21, financiado por MICIU/AEI/10.13039/501100011033. C. Serrano-Alcalde desea además agradecer al MICIU la concesión de su contrato predoctoral PRE2021-099878.

Referencias

- [1] Iqbal, S.; Safdar, B.; Hussain, I.; Zhang, K.; Chatzichristodoulou, C., Trends and Prospects of Bulk and Single-Atom Catalysts for the Oxygen Evolution Reaction. *Advanced Energy Materials*, 13(17), (2023), 2203913.
- [2] Suen, N. T.; Hung, S. F.; Quan, Q.; Zhang, N.; Xu, Y. J.; Chen, H. M.; Electrocatalysis for the oxygen evolution reaction: recent development and future perspectives. *Chemical Society Reviews*, 46(2), (2017), 337-365.

Electrocatalizadores derivados de residuos de bodega aplicados a la reacción de reducción de oxígeno

I. Vela, S. Pérez-Rodríguez, D. Sebastián, P. Napal, M. J. Lázaro

Instituto de Carboquímica (CSIC). Miguel Luesma Castán. 4. 50018, Zaragoza (España)

* *ivela@icb.csic.es*

Palabras clave: residuos vitivinícolas, materiales de carbono dopados con nitrógeno, reacción de reducción de oxígeno

Hoy en día, la electrocatálisis desempeña un papel fundamental en la lucha contra el cambio climático. Una aplicación de su uso es la producción de energía libre de emisiones contaminantes en dispositivos denominados pilas de combustible. En dichos dispositivos, la reacción limitante es la que ocurre en el cátodo, la reacción de reducción de oxígeno (ORR), con una cinética lenta y que precisa de una cantidad importante de catalizador [1]. Entre los materiales más utilizados como catalizadores en esta reacción se encuentran los basados en nanopartículas de platino soportadas sobre negro de carbono. La necesidad de un metal noble y escaso, encarece el coste total de la pila, complicando su comercialización [2].

Como alternativa, se están desarrollando catalizadores libres de metal basados en materiales de carbono dopados con nitrógeno. El dopado con nitrógeno provoca la redistribución electrónica en su superficie creando especies activas para la adsorción de moléculas de oxígeno [3]. Por otro lado, utilizar como fuente de carbono residuos biomásicos resulta prometedor ya que son sostenibles, baratos y, de este modo, se fomenta la economía circular [4].

El objetivo del trabajo es el estudio y optimización de la ruta de síntesis de materiales de carbono obtenidos a partir de raspones de uva y urea como electrocatalizadores para la ORR. Los materiales se caracterizaron fisicoquímicamente mediante técnicas de análisis de sólidos y electroquímicamente en una celda de tres electrodos con electrodo rotatorio de disco-anillo en KOH 0,1M. A partir de la ruta de síntesis optimizada se obtuvo un material de carbono libre de metal activo para la ORR y con prestaciones similares a un catalizador comercial de Pt/C.

Agradecimientos

Los autores desean agradecer al MCIN/AEI /10.13039/501100011033 por la financiación recibida por el proyecto de investigación PID2020-115848RB-C21 y al Gobierno de Aragón por la financiación al grupo T06_23R. I. Vela desea agradecer al CSIC la concesión de su beca JAE Intro ICU 2021-ICB-04. S. Pérez-Rodríguez agradece también al MCIN/AEI /10.13039/501100011033 la concesión de su contrato Juan de la Cierva-Incorporación IJC2019-041874-I.

Referencias

- ^[1] Y. Wang, K.S. Chen, J. Mishler, S.C. Cho, X.C. Adroher, "A review of polymer electrolyte membrane fuel cells: Technology, applications, and needs on fundamental research", *Appl. Energy* 88 (2011) 981–1007.
- ^[2] M.K. Debe, "Electrocatalyst approaches and challenges for automotive fuel cells", *Nature* 486 (2012) 43–51.
- ^[3] T. Wang, Z.X. Chen, Y.G. Chen, L.J. Yang, X.D. Yang, J.Y. Ye, H.P. Xia, Z.Y. Zhou, S.G. Sun, "Identifying the Active Site of N-Doped Graphene for Oxygen Reduction by Selective Chemical Modification", *ACS Energy Lett.* 3 (2018) 986–991.
- ^[4] D. Ou, S. Zheng, M. Zhu, R. Chen, T. Gao, H. Guo, J. Guo, J. Tang, "Excellent electrocatalytic performance of rice straw-derived carbon catalysts activated by zinc halides for oxygen reduction reaction", *Int. J. Hydrogen Energy* 50 (2024) 1373–1380.

Desarrollo de electrodos para supercondensadores de alta durabilidad mediante una estrategia de síntesis simple y sostenible

Emerson Vega-Ramírez^{*1}, Jessica Chaparro-Garnica¹, Emilia Morallón², Diego Cazorla-Amorós¹

¹ Departamento de Química Inorgánica and Instituto Universitario de Materiales, Universidad de Alicante, Alicante, Spain

² Departamento de Química Física and Instituto Universitario de Materiales, Universidad de Alicante, Alicante, Spain

* emersonraul.vega@ua.es

Palabras clave: supercondensadores; carbón activado dopado con N y P, análisis de ciclo de vida

El desarrollo de electrodos para supercondensadores ha avanzado significativamente en las últimas décadas gracias a diversas metodologías de síntesis que logran transformar residuos de biomasa en materiales prometedores para dicha aplicación. Sin embargo, a pesar de los avances significativos, en muchos casos la preparación de estos materiales suele requerir rutas de síntesis complicadas y de alto costo, así como el uso de productos químicos perjudiciales para el medio ambiente. La presente investigación se centra en aplicar la metodología de análisis de ciclo de vida al proceso de síntesis para producir carbones activados co-dopados con nitrógeno y fósforo [1], con el fin de evaluar de manera integral los impactos ambientales generados por el proceso e identificar oportunidades de mejora. La síntesis de estos materiales se lleva a cabo mediante activación química convencional con H_3PO_4 utilizando quitosano como precursor, el cual tiene un contenido significativo de nitrógeno en su estructura. Esta metodología de síntesis se destaca por su alta eficiencia involucrando pocos pasos de síntesis en comparación con otros estudios reportados [2-3], dando como resultado carbones activados co-dopados con N y P con un alto rendimiento, con buenas propiedades texturales ($S_{BET} = 1515 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$) y buen comportamiento electroquímico como electrodos de supercondensadores. Además, este enfoque reduce el impacto ambiental en comparación con otras metodologías de síntesis. Los materiales obtenidos presentan una excelente estabilidad como electrodos de supercondensadores simétricos con electrolito orgánico incluso después de 10.000 ciclos de carga-descarga, siendo comparable con el carbón comercial usado en esta aplicación (YP50F).

Agradecimientos

Este estudio forma parte del programa de Materiales Avanzados y ha sido apoyado por MCIN con financiación de la Unión Europea NextGenerationEU (PRTR-C17.11) y de la Generalitat Valenciana (MFA/2022/001).

Referencias

- [1] Chaparro-Garnica, J.; Guiton, M.; Salinas-Torres, D.; Morallón, E.; Benetto, E.; Cazorla-Amorós, D. Life Cycle Assessment of Biorefinery Technology Producing Activated Carbon and Levulinic Acid. *Journal of Cleaner Production* 2022, 380, 135098. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2022.135098>.
- [2] Chen, K.; Liu, J.; Bian, H.; Wang, W.; Wang, F.; Shao, Z. Dexterous and Friendly Preparation of N/P Co-Doping Hierarchical Porous Carbon Nanofibers via Electrospun Chitosan for High Performance Supercapacitors. *Journal of Electroanalytical Chemistry* 2020, 878, 114473. <https://doi.org/10.1016/j.jelechem.2020.114473>.
- [3] Xin, X.; Song, N.; Jia, R.; Wang, B.; Dong, H.; Ma, S.; Sui, L.; Chen, Y.; Zhang, Q.; Dong, L.; Yu, L. N, P-Codoped Porous Carbon Derived from Chitosan with Hierarchical N-Enriched Structure and Ultra-High Specific Surface Area toward High-Performance Supercapacitors. *Journal of Materials Science & Technology* 2021, 88, 45–55. <https://doi.org/10.1016/j.jmst.2021.02.014>.

Electrocatalizadores basados en MXenos y grafeno para aplicaciones de energía

Ricardo Hincapié¹, C.D Jaimes-Paez¹, Á. Berenguer-Murcia², Diego Cazorla-Amorós², Emilia Morallón¹

¹ Departamento de Química Física e Instituto Universitario de Materiales, Universidad de Alicante, Apartado 99, Alicante, E-03080, España

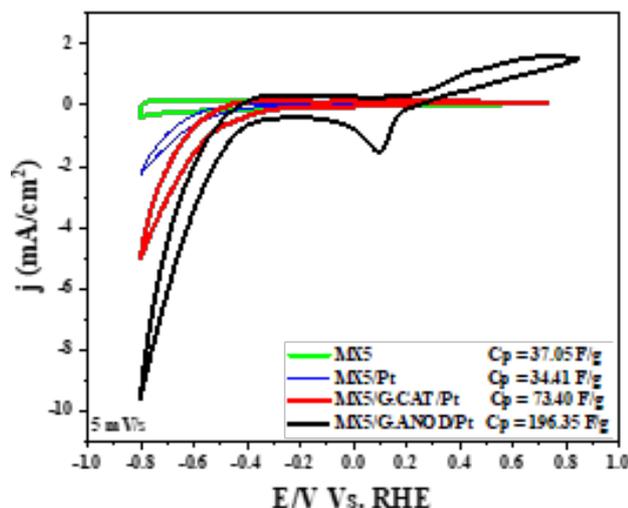
² Departamento de Química Inorgánica e Instituto Universitario de Materiales, Universidad de Alicante, Apartado 99, Alicante, E-03080, España

* ricardo.hincapie@ua.es

Palabras clave: MXenos, grafeno, electrocatálisis, hidrógeno verde

La creciente demanda de energías sostenibles ha impulsado el desarrollo de nuevos materiales avanzados como los MXenos, capaces de mejorar la eficiencia de los electrocatalizadores. La reacción de formación de hidrógeno (HER) es clave para producir hidrógeno verde, pero requiere reducir el uso de metales costosos como el platino. Los MXenos, gracias a su estructura bidimensional similar al grafeno y su capacidad para combinarse con nanopartículas metálicas, representa una solución prometedora para optimizar la conversión y almacenamiento de energía [1].

Este estudio detalla dos métodos para preparar materiales bidimensionales como MXenos y grafeno de pocas láminas. El primero sintetiza Ti_3C_2 a partir de Ti_3AlC_2 en fase MAX mediante tratamiento con ácido fluorhídrico y tratamiento con un disolvente orgánico para lograr su delaminación. En el segundo método, se exfolian electroquímicamente láminas de grafito para obtener materiales basados en grafeno. Finalmente, se incorpora platino (Pt) a los materiales mediante impregnación.



El material compuesto por MXene (Ti_3C_2), grafeno de pocas láminas obtenido mediante tratamiento anódico y nanopartículas de platino (Pt) presenta una capacidad de 196 F/g, superando a otras combinaciones. Además de su alta capacidad de almacenamiento de energía, este compuesto muestra una actividad electrocatalítica prometedora en la HER, lo que lo convierte en un candidato prometedor para la producción de hidrógeno verde y aplicaciones en supercondensadores.

Agradecimientos

Los autores agradecen a los proyectos PID2022-137566OB-I00 y PID2021-123079OB-I00 financiados por MCIN/AEI/10.13039/501100011033 y "ERDF/EU" y a la Generalitat Valenciana (CIGRIS/2022/075) por el apoyo financiero.

Referencias

[1] A. Eftekhari. Electrocatalysts for hydrogen evolution reaction. Int. J. Hydrogen Energy. 42 (2017) 11053–11077.

Monolitos de carbón fabricados con impresión 3D como soporte fase activa NiO-CeO₂ para la metanación de CO₂: efecto del sellado de la porosidad

I. Martínez-López^{*1}, J.C. Martínez-Fuentes¹, J. Bueno-Ferrer¹, A. Davó-Quñonero¹, E. Guillén-Bas¹, I. Martín-García¹, E. Bailón-García², D. Lozano-Castelló¹, A. Bueno-López¹

¹ Departamento de Química Inorgánica. Universidad de Alicante, Carretera de San Vicente s/n, Alicante

² Departamento de Química Inorgánica. Universidad de Granada, Avenida de la Fuente Nueva s/n. Granada

* ivan.martinez1@ua.es

Palabras clave: metanación de CO₂; porosidad; ceria; nanopartículas

Los monolitos de carbón son materiales versátiles que combinan las ventajas propias de los monolitos con las del carbón. Los monolitos sobresalen por proporcionar mejoras significativas en áreas como la transferencia de masa, la dispersión homogénea de la fase activa, la facilidad de reemplazo y reutilización, su resistencia mecánica y la reducción de caídas de presión, entre otros beneficios [1].

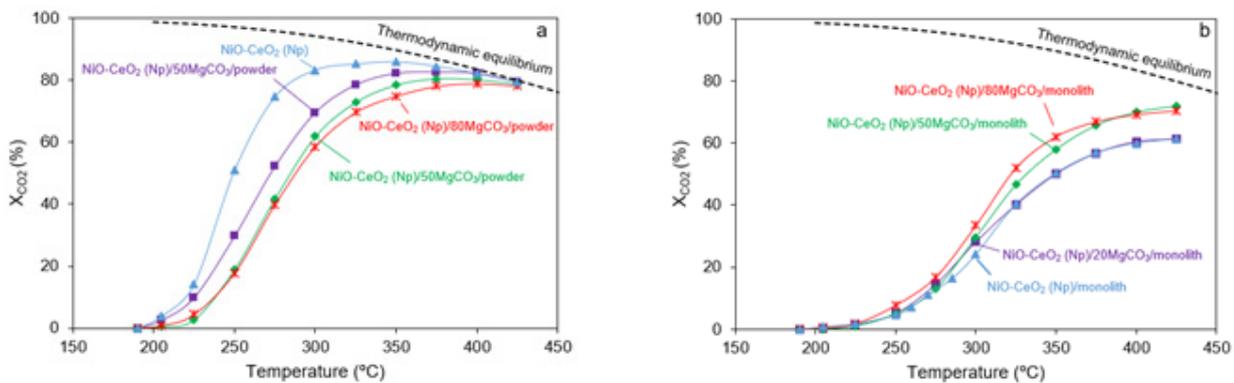


Figura 1. Ensayos con a) fases activas en polvo y b) catalizadores soportados en monolitos.

La Figura 1a muestra las curvas de conversión de CO₂ a CH₄ obtenidas con los monolitos. Se observa que el uso de 50 y 80 mg de carbonato de magnesio para sellar la porosidad del carbón genera un efecto positivo, mejorando la conversión a partir de 300 °C en comparación con las nanopartículas soportadas en el monolito sin sellar. Esto se debe a que, en el monolito sin sellar, las nanopartículas de NiO-CeO₂ se introducen en la matriz carbonosa, lo que las hace parcialmente inaccesibles para los gases reactivos [2]. Al sellar la porosidad con MgCO₃, se facilita la deposición de las nanopartículas de NiO-CeO₂ en las paredes de los canales, promoviendo su contacto con los gases reactivos. Sin embargo, cuando se emplea la fase activa en polvo (Figura 1b), el MgCO₃ afecta negativamente la actividad catalítica de las nanopartículas, lo cual sugiere que el beneficio observado en los monolitos se debe al sellado de la porosidad del carbón.

Referencias

[1] Tomašić, V., et al. State of the art in the monolithic catalysis/reactors. Appl. Catal. A Gen. 311 (2006), 112.

[2] Martínez-López, I., et al. Structural design and particle size examination on NiO-CeO₂ catalysts supported on 3D-printed carbon monoliths for CO₂ methanation. Journal of CO₂ Utilization, 81 (2024) 102733.

Catalizadores bifuncionales basados en materiales carbonosos para la producción y almacenamiento de hidrógeno mediante el sistema ácido fórmico-bicarbonato

P. Riquelme-García*, M. Navlani-García, D. Cazorla-Amorós

Departamento de Química Inorgánica e Instituto Universitario de Materiales, Universidad de Alicante, Ap. 99, Alicante, E-03080, España

* paula.riquelme@ua.es

Palabras clave: ácido fórmico, hidrógeno, carbón activado, paladio

El ácido fórmico ha emergido como un interesante LOHC (por sus siglas en inglés, *Liquid Organic Hydrogen Carrier*) debido a sus atractivas propiedades como su baja toxicidad, alta estabilidad y su alta densidad volumétrica de hidrógeno, lo que lo convierte en una solución potencial a los problemas de almacenamiento físico convencionales. Además, el ácido fórmico, se encuentra involucrado en un sistema de producción y almacenamiento de hidrógeno basado en un ciclo neutro de carbono, formado por la deshidrogenación de ácido fórmico para producir hidrógeno y dióxido de carbono, y la posterior hidrogenación del dióxido de carbono. La reacción de hidrogenación de CO₂ es más compleja que la inversa, la deshidrogenación de ácido fórmico, debido a su desfavorable termodinámica (CO₂ (g) + H₂ (g) → HCOOH (l), ΔG_{298K} = 32,9 kJ·mol⁻¹) [1]. El método más directo para superar la limitación termodinámica es llevar a cabo la reacción en fase líquida utilizando bases como bicarbonatos, aminas e hidróxidos [2].

En este trabajo, se han preparado carbones activados a partir de residuos de biomasa (cáscara de almendra) mediante un método de activación física con dióxido de carbono, los cuales se han empleado como soportes de catalizadores basados en paladio y con diferentes composiciones bimetálicas para la interconversión H₂-formiato a través de la deshidrogenación del ácido fórmico y la hidrogenación de bicarbonato. Los materiales desarrollados se caracterizaron mediante diferentes técnicas fisicoquímicas como isotermas de adsorción de N₂ a 77K, la espectroscopia fotoelectrónica de rayos X (XPS), la microscopia electrónica de transmisión (TEM) y la espectroscopia de emisión óptica por plasma de acoplamiento inductivo (ICP-OES). Los resultados de las pruebas catalíticas de ambas reacciones mostraron resultados con una prometedora actividad bifuncional y con una estabilidad mantenida tras 3 ciclos consecutivos de reacción.

Agradecimientos

Los autores agradecen al Proyecto TED2021-131324B-C22 financiado por MCIN/AEI/ 10.13039/501100011033 y por "European Union NextGenerationEU/PRTR". M. Navlani-García agradece la subvención RYC2021-034199-I financiada por MCIN/AEI/ 10.13039/501100011033 y por «ESF Investing in your future».

Referencias

- [1] Riquelme-García, P.; Navlani-García, M.; Cazorla-Amorós, D.; "Hydrogen Storage System Attained by HCOOH-CO₂ Couple: Recent Developments in Pd-Based Carbon-Supported Heterogeneous Catalysts", *Energies* 17. (2024).
- [2] Verma, P.; Zhang, S.; Song, S.; Mori, K.; Kuwahara, Y.; Wen, M.; Yamashita, H.; An, T.; "Recent strategies for enhancing the catalytic activity of CO₂ hydrogenation to formate/formic acid over Pd-based catalyst", *Journal of CO₂ Utilization* 54. (2021).

Sensores electroquímicos basados en materiales grafénicos para la detección de acetaminofeno en agua

L. Quintana*, A. Vigil, M. Granda, P. Álvarez, R. Menéndez, Z. González

Instituto de Ciencia y Tecnología del Carbono, INCAR (CSIC), Francisco Pintado Fe 26, 33011 (Oviedo-Asturias, España).

* lucia.quintana@incarcsic.es

Palabras clave: sensores electroquímicos, materiales grafénicos, impresión por inyección de tinta, contaminantes emergentes

En las últimas décadas, la demanda global de agua ha aumentado considerablemente debido al crecimiento de la población mundial y al desarrollo económico. Es por ello que la principal preocupación es garantizar el acceso al agua potable, haciendo frente, fundamentalmente, a los problemas de contaminación de dicho medio. Desgraciadamente, la calidad del agua se ve seriamente comprometida por la presencia de un amplio número de contaminantes. Entre ellos se encuentran los denominados “contaminantes emergentes” (CEs), entre los que destacan los productos farmacéuticos [1]. Su uso generalizado plantea un importante desafío ambiental, ya que pueden infiltrarse en el agua potable. Su presencia no solo representa una amenaza para la salud humana, sino también para la fauna y los ecosistemas acuáticos, por lo que es crucial detectarlos de manera adecuada.

Como alternativa a los métodos analíticos comúnmente empleados para detectar estos CEs (cromatografía líquida o de gases, espectrometría de masas, etc), caracterizados por sus largos tiempos de análisis, su compleja instrumentación y elevado coste, los sensores electroquímicos han despertado un interés creciente gracias a su sencillez, facilidad de uso y automatización, así como por su potencial miniaturización [2]. Tradicionalmente se han venido empleando electrodos de carbono vítreo (GCEs) o serigrafados (SPEs) modificados con diversos nanomateriales para la detección de estos analitos. Sin embargo, en los últimos años, la posibilidad de fabricar electrodos de manera sencilla, barata y escalable mediante impresión por inyección de tinta (o inkjet printing, IPEs) ha abierto una nueva línea de diseño y fabricación de sensores.

El principal objetivo de este trabajo es la evaluación de IPEs basados en materiales grafénicos como nuevas plataformas sensoras para detectar compuestos farmacéuticos como el acetaminofeno (ACF), comparando su rendimiento electroquímico con el de los sensores electroquímicos tradicionales. Para ello se optimizarán diferentes tintas, con las propiedades adecuadas vs. el novedoso método de fabricación y se evaluará el comportamiento de los sensores fabricados empleando diferentes técnicas electroquímicas (CV y DPV).

Agradecimientos

Estos resultados están enmarcados dentro del Proyecto PID2022-139478OB-100 financiado por [MICIU/AEI/10.13039/501100011033](#) y por FEDER, UE.

Referencias

[1] Boxall A., “The environmental side effects of medication”, EMBO reports 5 (2004) 1110.

[2] Meenakshi S.; Rama R.; Pandian K.; Gopinath S.C.B.; “Modified electrodes for electro-chemical determination of metronidazole in drug formulations and biological samples: An overview”, Microchem. Journal 165 (2021) 106151.

Nanofibras de carbono funcionalizadas con fósforo como soportes de catalizadores de níquel para reacciones de hidroconversión

M. Andrades*, C. Di Stasi, D. Torres, I. Suelves, J.L. Pinilla

Instituto de Carboquímica, CSIC, C/ Miguel Luesma Castán 4, Zaragoza 50018, España

*mandrades@icb.csic.es

Palabras clave: catalizadores heterogéneos, nanofibras de carbono, fósforo, hidrogenación

La hidrogenación catalítica de tolueno a metilciclohexano es esencial en la industria petroquímica, ya que éste es un compuesto clave para la síntesis de diversos productos químicos. Asimismo, este proceso puede usarse para almacenar y transportar hidrógeno de manera segura, y como reacción modelo para evaluar la capacidad de hidrogenación de un catalizador. El presente trabajo explora la utilización de nanofibras de carbono (CNF) funcionalizadas con P como soporte de catalizadores de Ni para la hidrogenación de tolueno y la hidroconversión de n-hexadecano, compuesto utilizado como modelo de cera de Fischer-Tropsch. El P modifica las propiedades superficiales y electrónicas de las CNF, lo que podría mejorar la dispersión y la actividad catalítica del catalizador resultante [1]. De este modo, se desarrollaron y caracterizaron catalizadores de Ni (10% p/p) sobre CNF funcionalizadas con P (Ni10/CNF-P-X, donde X representa la relación en masa H_3PO_4/CNF). Los catalizadores sintetizados fueron caracterizados mediante XRD, ICP-OES y titulaciones de Boehm para cuantificar la acidez de Brønsted. El desempeño catalítico en la hidrogenación de tolueno se evaluó bajo condiciones controladas (90 min, 35 bar de H_2 , 150 °C, disolvente n-decano). Los resultados (Tabla 1) mostraron una mejora significativa en la conversión de tolueno al utilizar catalizadores basados en CNF funcionalizadas con P. Sin embargo, una funcionalización excesiva del soporte afectó negativamente a la actividad catalítica del catalizador a pesar de lograrse una mayor reducción del tamaño cristalino del Ni, como se evidenció en los análisis de XRD. Estos materiales fueron estudiados posteriormente en la hidroisomerización de hexadecano en un reactor de lecho fijo operando en modo continuo a 400 °C, 20 bar de H_2 y WSHV de $7 h^{-1}$. En este caso, la funcionalización con P redujo considerablemente tanto la conversión de hexadecano como la selectividad a isómeros lo que sugiere que la acidez introducida por el P no es adecuada para la reacción de isomerización de hexadecano.

Tabla 1. Caracterización y resultados catalíticos de los catalizadores sintetizados.

Catalizador	Ni (% en peso)	P (% en peso)	Ni (nm)	Acidez Brønsted (mmol sitios ácidos g_{cat}^{-1})	$X_{Tolueno}$ (mmol Tolueno g_{Ni}^{-1})
Ni10/CNF	10.3	-	19.7	2.0	171
Ni10/CNF-P-	11.0	2.5	9.3	2.2	533
Ni10/CNF-P-1	9.6	3.7	12.4	2.1	545
Ni10/CNF-P-3	9.8	4.3	8.8	2.3	360
Ni10/CNF-P-5	7.6	4.3	7.7	3.1	124

Agradecimientos

Los autores agradecen a MCIN con fondos NextGenerationEU de la Unión Europea (PRTR-C17-I1) dentro del programa Energía e Hidrógeno Verde-CSIC, como parte de la Plataforma Temática Interdisciplinar del CSIC (PTI+) Transición Energética Sostenible+ (PTI-TRANSENER+).

Referencias

[1] Ma, Y., Shan, Z. Phosphorus-doped nanoflower-like porous carbon with well-dispersed RuP sites embedded for enhancing hydrogenation of 4-nitrophenol. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 2023, 676, 132122.

Reformado con vapor de líquidos de pirólisis empleando catalizadores de Ni soportados sobre carbones activados

P. Cabrera-Reyes^{*1}, M. N. Rivas-Márquez¹, P. Riquelme-García², R. Ruiz-Rosas¹, M. Navlani², J. M. Rosas¹, D. Cazorla-Amorós², J. Rodríguez-Mirasol¹, T. Cordero¹

¹Dpto. de Ingeniería Química, Escuela de Ingenierías Industriales, Universidad de Málaga

²Dpto. de Química Inorgánica e Instituto de Materiales, Universidad de Alicante

* paulacabrera@uma.es

Palabras clave: reformado con vapor, biomasa, carbones activados, níquel

El reformado con vapor de agua (SR) de los líquidos generados en la pirólisis de residuos biomásicos (RB) supone una ruta sostenible de obtención de hidrógeno, pudiendo llevarse a cabo empleando catalizadores de níquel soportados en carbones activados (AC) preparados a partir de estos mismos residuos, mejorando la sostenibilidad del proceso [1]. En este trabajo se propone estudiar el efecto del soporte en el comportamiento de catalizadores de níquel para el SR de ácido acético (AA), como compuesto modelo de los líquidos de pirólisis de RB.

Para ello, se prepararon catalizadores de níquel con 10% en peso sobre AC obtenidos a partir de hueso de aceituna por i) carbonización a 800 °C (HAC), ii) gasificación de HAC con vapor de agua a 850 °C (HAW) y iii) gasificación de HAC con CO₂ a 780 °C (HAG). Los catalizadores fueron caracterizados y empleados en el SR de AA en condiciones estequiométricas, a 700 °C, C_{AA}= 3,9%, caudal de 243 ml STP/min y masa de 100 mg.

La actividad de los catalizadores respecto a la masa de Ni superficial sigue el orden HAG > HAW > HAC, donde HAG y HAC mantienen una selectividad a H₂ del 53 y del 58%, respectivamente. Tras 12 horas de reacción, esta actividad aumenta en HAC, alcanzando valores similares a los de HAG (Fig. 1a). Sin embargo, el catalizador HAW muestra una menor actividad, ya que el Ni no se encuentra totalmente accesible (XPS, Fig. 1b), y una selectividad a H₂ menor, del 23%. Además, experimenta un descenso de su actividad desde 0,4 hasta 0.1 molAA·gNi⁻¹·h⁻¹, debido a que el coque producido tapona el acceso a la fase activa. En el caso de los catalizadores HAG y HAC, estos ven ocluida su microporosidad, pero simultáneamente se generan nanotubos de carbono, responsables de mantener su actividad catalítica.

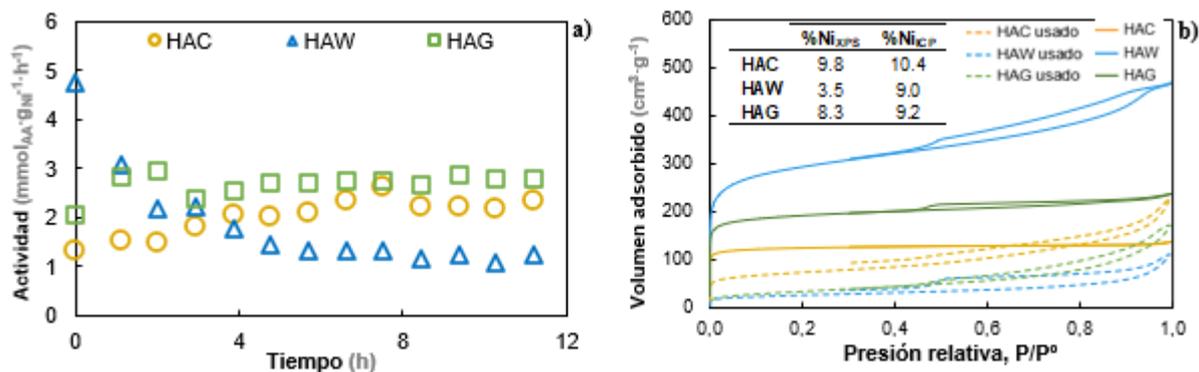


Figura 1. Conversión de AA en SR por masa de Ni superficial (a) e isothermas de adsorción-desorción de N₂ (b).

Agradecimientos

Los autores agradecen el apoyo económico al MCIN (PID2022-140844OB-I00 y TED2021-131324B-C21) y a la Unión Europea "NextGenerationEU"/PRTR (MCIN/AEI/10.13039/501100011033). PCR agradece a la Universidad de Málaga la concesión de su ayuda predoctoral.

Referencias

[1] Cabrera-Reyes, P. et al., "Sustainable carbon-based nickel catalysts for the steam reforming of model compounds of pyrolysis liquids", Fuel Processing Technology 253 (2024) 1-15.

Análisis de transferencia de masa en la biosorción de residuos textiles en fibras de ixtle *Agave Kerchovei* Lem

Luis Alfonso Cavazos-Cuello^{*1,2}, Agustín Francisco Pérez-Cadenas¹, Jacob Josafat Salazar-Rábago²

¹ UGR-Carbon, Materiales Polifuncionales Basados en Carbono, Dpto. Química Inorgánica-Unidad de Excelencia Química Aplicada a Biomedicina y Medioambiente - Universidad de Granada (UEQ-UGR), ES18071- Granada, España

² Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Nuevo León, Pedro de Alba S/N 66455, San Nicolás de los Garza.

* luiscacl97@correo.ugr.es

Palabras clave: biosorción, difusión - permeación, fibra de Agave

El Azul de Metileno (AM) es un colorante catiónico ampliamente utilizado en aplicaciones desde textiles hasta médicas. Se ha reportado que su presencia en cuerpos de aguas residuales irrumpe los procesos fotosintéticos de microorganismos acuáticos [1]. Una solución propuesta a esta problemática es la biosorción, consistente en la retención superficial del colorante en una biomasa no viva. Históricamente se ignoraban los fenómenos difusivos en la biosorción, limitando su descripción a modelos semi-empíricos. Sin embargo, investigación reciente revela que existe una combinación de difusión y permeación a través de la membrana polimérica de los biosorbentes [2], por lo que el presente trabajo estudia la remoción de AM empleando fibras de *Agave Kerchovei* Lem, una especie de ixtle endémica de México empleando modelos difusionales. El análisis consistió en caracterización fisicoquímica y morfológica de la fibra natural, así como experimentos de equilibrio y cinéticas de adsorción a pH = 7 y T = 25 °C. La caracterización fisicoquímica reveló un carácter predominantemente ácido, así como un pH_{PZC} de 3,69. La caracterización morfológica reveló una geometría rectangular con diámetro de promedio de 0,1 mm. Los experimentos de equilibrio de adsorción demostraron capacidades de remoción en torno a 70 mg/g presentando isothermas del tipo Freundlich. El análisis cinético demostró tiempos de equilibrio de 6 horas con coeficientes de permeación de $4,10 \times 10^{-10}$ hasta $1,3 \times 10^{-8}$ cm²/s. Estos resultados demuestran la viabilidad del uso de las fibras de ixtle como biosorbente así como la obtención de parámetros de diseño para columnas industriales para la purificación más eficiente de efluentes impactados por colorantes.

Referencias

[1] Y. Kuang, X. Zhang, and S. Zhou, "Adsorption of methylene blue in water onto activated carbon by surfactant modification," *Water (Switzerland)*, vol. 12, no. 2, pp. 1–19, 2020, doi: [10.3390/w12020587](https://doi.org/10.3390/w12020587).

[2] R. Leyva-Ramos, J. J. Salazar-Rábago, and R. Ocampo-Pérez, "A novel intraparticle mass transfer model for the biosorption rate of methylene blue on white pine (*Pinus durangensis*) sawdust. Diffusion-permeation," *Chem. Eng. Res. Des.*, vol. 172, pp. 43–52, 2021, doi: [10.1016/j.cherd.2021.05.029](https://doi.org/10.1016/j.cherd.2021.05.029).

Catalizadores estructurados de base carbonosa para la producción de metanol mediante hidrogenación de CO₂

R. Jiménez-Gómez*, R. Ruíz -Rosas, J.M. Rosas, J. Rodríguez-Mirasol, T. Cordero

Universidad de Málaga, Andalucía Tech, Departamento de Ingeniería Química, Escuela de Ingenierías Industriales, Campus de Teatinos s/n, 29010 Málaga, España

* mrociojg@uma.es

Palabras clave: CO₂, H₂, metanol, fibras

El metanol es un compuesto químico de gran interés, que se considera una molécula plataforma, para la obtención de compuestos de alto valor añadido y un vector de hidrógeno. El metanol se puede obtener por hidrogenación de CO₂ con catalizadores de Cu/Zn. Para hacer aumentar la sostenibilidad del proceso, se propone el uso de fibras de base carbonosa obtenidas a través de un subproducto de la industria papelera, la lignina, como soporte catalítico. En este trabajo, se estudió el efecto del método de carga de la fase activa en el comportamiento catalítico.

Para la preparación del catalizador se empleó una disolución de lignina en etanol dando lugar a las fibras electrohiladas. Tras su estabilización en aire a 200 °C y su posterior carbonización a 900 °C, se usaron como soporte catalítico, añadiéndose las correspondientes fases activas de Cu/ZnO en una relación másica 3/2. Para ello, se emplearon como técnicas de carga la impregnación con humedad en exceso y la electrodeposición. Posterior a su incorporación, se realizó un tratamiento térmico en atmósfera de N₂ a 400 °C para descomponer la sal.

Los catalizadores resultantes fueron evaluados en la reacción de hidrogenación de CO₂ en un reactor de lecho fijo a presión de 30 bar, con una relación H₂/CO₂ de 3/1, un flujo volumétrico de 75 mL/min, en el que se varió la temperatura entre 220 y 340 °C. El catalizador preparado por impregnación húmeda presentó una conversión de CO₂ creciente con el aumento de la temperatura, alcanzándose el máximo de conversión (11%) a 340 °C (Fig 1), manteniendo una selectividad 100% a metanol durante todo el tiempo de reacción, resultados comparables con los obtenidos por electrodeposición. En la Fig. 1 se incluye la conversión en el equilibrio.

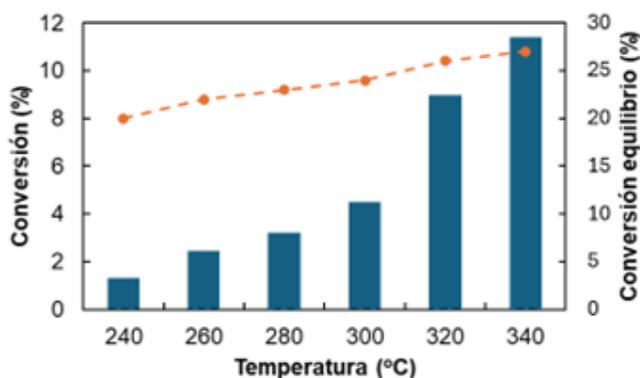


Figura 1. Conversión de CO₂ a las distintas temperaturas de reacción (30 bar, FT = 75 mL/min, H₂/CO₂ = 3/1) y la conversión en el equilibrio a cada temperatura.

Agradecimientos

Los autores agradecen al MCIN PID2022-140844OB-I00 y al MCIN y a la UE "NextGenerationRU/PRTR (MCIN/AEI/10.13039/50110001103) y (TED2021-131324B-C21). R.J.G agradece a MCIN la concesión del contrato predoctoral PRE2022-00329.

Catalizadores fibrilares de base carbonosa con hierro disperso para la síntesis de Fischer-Tropsch

J. Meca-Romero*, F.J. García-Mateos, M.J. Valero-Romero, R. Ruiz-Rosas, J.M. Rosas, J. Rodríguez-Mirasol, T. Cordero

Departamento de Ingeniería Química, Andalucía Tech, Universidad de Málaga, Campus de Teatinos s/n, 29010 Málaga, España

* jacmeca@uma.es

Palabras clave: síntesis de Fischer-Tropsch, catalizadores de Fe, fibras de carbono, lignina

La disminución de las reservas de petróleo unido a la preocupación por los efectos del cambio climático ha impulsado la búsqueda y desarrollo de alternativas sostenibles para la producción de combustibles líquidos, olefinas de cadena corta y productos químicos de alto valor añadido. En este contexto, la síntesis de Fischer-Tropsch (SFT) a partir de gas de síntesis ($\text{CO} + \text{H}_2$) obtenido de la gasificación de biomasa residual se plantea como una tecnología alternativa y más sostenible a la ruta tradicional procedente del petróleo.

El uso de catalizadores de base carbonosa y morfología fibrilar presenta una alta dispersión de la fase metálica, menores problemas difusionales y menor pérdida de carga en el reactor, así como una menor interacción metal-soporte y una porosidad y química superficial ajustable. En este trabajo, se propone la preparación de catalizadores de hierro inmovilizados en fibras de carbono derivadas de biomasa residual para la producción de hidrocarburos mediante la SFT.

Los catalizadores se han preparado mediante la técnica de electrohilado, en un solo paso, usando disoluciones de lignina Alcell®/etanol/nitrato de hierro con una relación másica de 0,86/1/0,01. Las fibras de lignina se han estabilizado a 200 °C, con una velocidad de calentamiento de 0,5°C/min en atmósfera de aire y se han carbonizado a 500 °C, estudiando el efecto del tiempo de carbonización (0-6 horas). Se ha estudiado la actividad catalítica de los catalizadores después de reducirlos en atmósfera de H_2 (450 °C, 8 h) en un reactor a presión de lecho fijo a 20 bar, 340 °C, 50 mmolCO,STP $\text{g}_{\text{Fe}}^{-1} \text{min}^{-1}$ y una relación CO/H_2 de 1. La nomenclatura que se ha utilizado es $\text{Fe}@FCXh$, siendo FC de fibra de carbón, Fe de hierro, X del tiempo de carbonización en horas (h). Los resultados se muestran en la Tabla 1.

Los catalizadores preparados presentan una estructura principalmente microporosa con superficies específicas entre 300-400 m^2/g y contenidos másicos de Fe entre 3-4%. Se ha observado un aumento de las fases de carburos de hierro y magnetita con el aumento del tiempo de carbonización (XPS), lo que produce un aumento de la conversión de CO, favoreciendo la selectividad a hidrocarburos de cadena larga (C_5+) y reduciendo la selectividad a CH_4 .

Tabla 1. Conversión de CO y selectividad a los distintos productos durante la SFT después de 24 h de reacción.

Catalizador	XCO (%)	SCO ₂ (%)	SCH ₄ (%)	SC2-C4 (%)	SC5+ (%)
Fe@FC0h	6.8	50.8	19.5	26.1	3.5
Fe@FC3h	50.72	52.97	13.03	29.91	4.09
Fe@FC6h	66.37	51.23	11.44	27.19	10.14

Agradecimientos

Los autores agradecen al MCINN por la concesión de los proyectos PID2022-140844OB-I00, CNS2022-135418, para incentivar la consolidación investigadora y TED-2021-131324B-C21 por MICIN/AEI/10-13039/501100011033 y por la Unión Europea "Next Generation EU/PRTR.

Alternativas sostenibles para la revalorización de residuos derivados de la industria agroalimentaria del cáñamo

E. Muñoz*, P. Díaz, M. Díaz-Somoano

Grupo de Metales y Medioambiente, Departamento de Procesos Químicos Sostenibles, Instituto de Ciencia y Tecnología del Carbono (INCAR), CSIC, Oviedo

* e.muniz@incar.csic.es

Palabras clave: biosorción, tratamiento de aguas, cáñamo, economía circular

El cultivo de cáñamo ha aumentado notablemente en los últimos años debido a su incorporación a numerosos sectores industriales, siendo las semillas y la fibra de cáñamo los productos de mayor interés [1]. La creciente demanda de este tipo de productos plantea una interesante ventana de oportunidad. Sin embargo, para garantizar la sostenibilidad de este tipo de actividad es necesario buscar soluciones que permitan el aprovechamiento y revalorización de los residuos generados. En este sentido, una de las opciones más ventajosas es la recuperación de residuos de naturaleza lignocelulósica como adsorbentes para la eliminación de contaminantes en aguas [2].

El objetivo de este trabajo es la caracterización de los residuos generados durante la extracción de aceite de cáñamo y su evaluación como biosorbentes en procesos de tratamiento de aguas. Para ello, los distintos residuos, como las cáscaras de semilla (HSS) o el cañizo (HS), se analizarán empleando diferentes técnicas para seleccionar los más adecuados para este tipo de aplicación. Posteriormente, los residuos seleccionados, se someterán a tratamientos químicos suaves, para evitar la degradación del material. Por último, se evaluará el comportamiento de los materiales, tratados y sin tratar, como biosorbentes frente a una serie de contaminantes seleccionados atendiendo a su ocurrencia y toxicidad en medio acuoso: el mercurio (Hg) y los colorantes Azure B (AB), Verde Malaquita (VM) y Rojo Congo (RC) [3,4].

Los resultados obtenidos hasta el momento indican que los residuos de cáñamo, tanto HS como HSS, sin ningún tipo de tratamiento son adecuados para la eliminación de Hg, con eficiencias entre el 75% y 82%. Este estudio propone que existe una relación directa entre el contenido de lignina de los materiales y su capacidad de biosorción frente a este contaminante. Por otro lado, un tratamiento básico consigue aumentar la capacidad de retención de HSS debido a un aumento de grupos oxigenados asociados a la celulosa, llegando a superar los 46 mg/g de retención para la eliminación de AB y VM con eficiencias de casi el 90% en ambos casos. Mediante el tratamiento del material en condiciones ácidas suaves se consigue mejorar el rendimiento del material como biosorbente frente a contaminantes de naturaleza básica como el Rojo Congo.

Agradecimientos

Las autoras agradecen a las empresas Cáñamo Valley y Sr. Valley Hemp Foods (Asturias) la cesión de los residuos de cáñamo derivados de su actividad y a FICYT la financiación recibida (AYUD/2021/51379 y AYUD/2021/57543). E.M.G. agradece la ayuda al "Programa Investigo" del "Plan de Recuperación, Transformación y Resiliencia" financiado por la Unión Europea – NextGenerationEU.

Referencias

- [1] Moscariello, C., et al., "From residue to resource: The multifaceted environmental and bioeconomy potential of industrial hemp (*Cannabis sativa* L.)", *Resources, Conservation & Recycling* vol 175. (2021) 105864.
- [2] Kyzas, G.Z.; Kostoglou, M. "Green Adsorbents for Wastewaters: A Critical Review". *Materials* vol. 7. (2014) 333-364.
- [3] Guo, Lin. et al., "Selective removal behaviour and mechanism of trace Hg (II) using modified corn husk leaves", *Chemosphere* vol 225. (2019) 65-72.
- [4] Lellis, B. et al., "Effects of textile dyes on health and the environment, "Effect and bioremediation potential of living organisms", *Biotech. Res. Innov.* vol. 3 (2019) 275-290.

Reducción electroquímica de CO₂ a gas de síntesis utilizando geles de carbono-compuestos de grafeno verde como electrocatalizador libre de metales

Ramírez-Valencia L.D.*, Bailón-García E., Moral-Rodríguez A.I., Carrasco-Marín F., Pérez-Cadenas A.F.

Materiales Polifuncionales Basados en Carbono (UGR-Carbon), Dpto. Química Inorgánica-Unidad de Excelencia Química Aplicada a Biomedicina y Medioambiente- Universidad de Granada (UEQ-UGR), ES18071-Granada, Spain.

* liliandr@correo.ugr.es

Palabras clave: gas de síntesis, eco-grafeno, xerogel de carbono, microesferas

La electroreducción de CO₂ para la generación de productos de alto valor añadido representa un enfoque prometedor para mitigar el exceso de este gas en la atmósfera, contribuyendo así a la reducción de gases de efecto invernadero. Entre los productos derivados de esta reducción, el monóxido de carbono (CO) destaca por su bajo requerimiento energético para su producción y su capacidad para combinarse con el hidrógeno generado durante la electroreducción del agua, formando un gas de síntesis altamente valorado en diversos procesos industriales. Esto ha impulsado un amplio campo de investigación enfocado en el desarrollo de catalizadores bifuncionales que optimicen la relación H₂/CO, ofreciendo un alto rendimiento electroquímico y siendo, al mismo tiempo, de síntesis práctica, económica y ambientalmente sostenible. En este estudio, se han sintetizado microesferas de xerogel de carbono dopadas con eco-grafeno [1]. La inclusión de eco-grafeno confiere un elevado carácter grafitico, además de la presencia de grupos nitrogenados y quinonas. Estas características no solo mejoran la selectividad en la producción de CO, sino que también reducen el sobrepotencial en las reacciones de reducción de CO₂ y agua. Además, la morfología esférica y la porosidad de los xerogeles de carbono facilitan la accesibilidad de los reactivos a los sitios activos. La combinación de estos factores ha permitido alcanzar una relación H₂/CO óptima de entre 1 y 3 (Figura 1), demostrando que estos electrocatalizadores pueden emplearse en una síntesis Fischer-Tropsch acoplada. Además, alcanzan una alta selectividad para la electroreducción de CO₂ a CO, logrando una eficiencia farádica máxima del 89,2% (Figura 2).

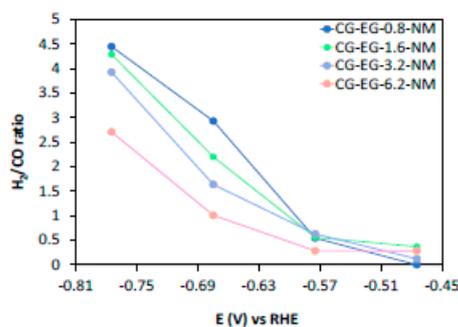


Figura 1. H₂/CO a diferentes potenciales.

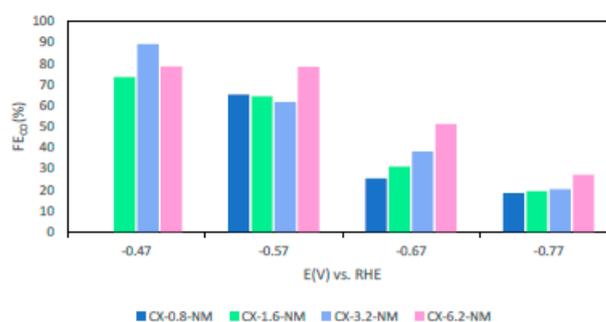


Figura 2. FE_{CO} a diferentes potenciales.

Referencias

[1] Mohamed, M. A. A., Carrasco-Marín, F., Eleesawy, N. A. & Hamad, H. A. F. Glucose-Derived N-Doped Graphitic Carbon: Facile One-Pot Graphitic Structure-Controlled Chemical Synthesis with Comprehensive Insight into the Controlling Mechanisms. *ChemistrySelect* 5, 14685–14702 (2020).

Estudio de estabilidad de catalizadores ácidos de base carbonosa en la pirólisis rápida de residuos biomásicos

M.C. Recio-Ruiz*, R. Ruiz-Rosas, J.M. Rosas, J. Rodríguez-Mirasol, T. Cordero

Departamento de Ingeniería Química, Escuela de Ingenierías Industriales, Universidad de Málaga, Andalucía Tech, Campus de Teatinos s/n, 29010 Málaga, España

* mrecio@uma.es

Palabras clave: biomasa, pirólisis rápida catalizada, carbones activos ácidos, coque

El uso de catalizadores ácidos de base carbonosa en la pirólisis rápida de residuos biomásicos es de gran relevancia debido a su carácter renovable y su capacidad para reducir el contenido en oxígeno en la fracción líquida (bio-oil), mejorando la calidad de este. No obstante, su estabilidad en condiciones de reacción determina, también, sus posibilidades de aplicación industrial. En este trabajo se propone un estudio de la desactivación de estos catalizadores en la reacción de pirólisis, así como su posible regeneración, para prolongar la vida útil de éstos. Se ha estudiado la pirólisis convencional, rápida y rápida catalizada del hueso de aceituna (HA). Para la pirólisis rápida catalizada, se han probado 4 catalizadores diferentes, dos catalizadores comerciales (γ -Al₂O₃ y H-ZSM-5), y dos catalizadores de base carbonosa, (ACP y ACPZr), estos últimos preparados por activación química de hueso de aceituna con H₃PO₄.

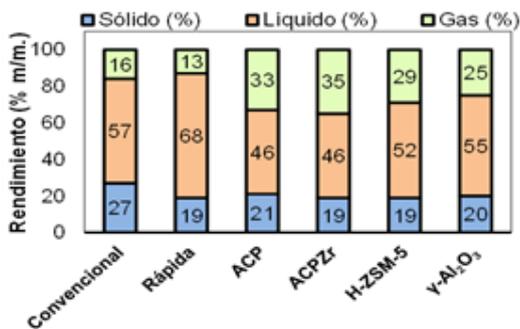


Figura 1. Rendimientos (% m/m) de las diferentes fracciones de la pirólisis de hueso de aceituna (HA), en un reactor de lecho fijo, a una temperatura de 500°C, en atmósfera inerte.

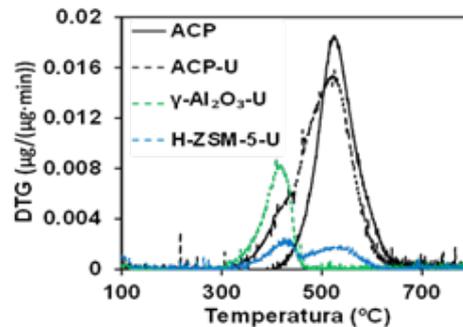


Figura 2. Derivada de la pérdida de masa (en aire) del catalizador ACP fresco y los usados (ACP-U, γ -Al₂O₃-U, H-ZSM-5-U) en la pirólisis rápida catalizada de HA.

La Figura 1, muestra la distribución de producto a las diferentes fracciones obtenidas, siendo la fracción líquida la más abundante. El carácter ácido de los catalizadores ha favorecido las reacciones de craqueo y desoxigenación reduciendo, en todos los casos, la fracción a bio-oil, e incrementando la fracción gaseosa. Tras la reacción de pirólisis, los catalizadores han sido analizados mediante termogravimetría en aire, observándose la aparición de picos correspondientes a la gasificación del coque formado durante el proceso de pirólisis, Figura 2. Los resultados muestran la viabilidad de usar catalizadores ácidos preparados a partir de HA para la pirólisis de este mismo residuo, consiguiendo una reducción del contenido en oxígeno en el bio-oil. El estudio de la desactivación y la regeneración de estos catalizadores permite una optimización de los procesos de preparación del catalizador y de pirólisis.

Agradecimientos

Esta investigación ha sido financiada a través de los proyectos PID2022-1408440B-I00 y TED-2021-131324B-C21 por MCIN/AEI/10.13039/501100011033 y por la Unión Europea "Next GenerationEU"/PRTR. M.C.R.R agradece a MCINN por la subvención FPI (PRE2019-089340).

Catalizadores bimetálicos de base carbonosa para la reacción de Water Gas Shift

M. N. Rivas-Márquez^{*1}, P. Riquelme-García², R. Ruiz-Rosas¹, M. Navlani², J.M. Rosas¹, D. Cazorla-Amorós², J. Rodríguez-Mirasol¹, T. Cordero¹

¹ Departamento de Ingeniería Química, Facultad de Ciencias, Universidad de Málaga

² Departamento de Ingeniería Química e Instituto de Materiales, Universidad de Alicante

* nerearivasmárquez@uma.es

Palabras clave: hueso de aceituna, carbones activados, catalizadores Cu-Zn, water gas shift

El hidrógeno es una fuente de energía limpia y versátil, clave en la transición hacia un futuro energético sostenible. Una de las formas de producirlo es a través de la reacción de *water gas shift* (WGS), en la que el CO reacciona con $\text{H}_2\text{O}(\text{v})$, produciendo CO_2 e H_2 . Para hacer más eficiente este proceso los catalizadores juegan un papel crucial, al acelerar la reacción y mejorar su selectividad. Existe un creciente interés en el desarrollo de catalizadores de base carbonosa por su elevado desarrollo poroso, química superficial controlable y alta estabilidad química, siendo además más sostenibles si se obtienen a partir de biomasa residual. El objetivo de este trabajo es evaluar la eficiencia de catalizadores bimetálicos, de Cu/ZnO, soportados sobre carbones activados derivados de biomasa residual, el hueso de aceituna, en la reacción WGS.

El carbón activado ($A_{\text{BET}} = 1188 \text{ m}^2/\text{g}$) se preparó por activación física de un carbonizado de hueso de aceituna a $800 \text{ }^\circ\text{C}$ y posterior gasificación con $\text{H}_2\text{O}(\text{v})$, a $850 \text{ }^\circ\text{C}$. Sobre el mismo se depositó, mediante impregnación húmeda, un 15% m/m de Cu (Cu15@HAG), así como Cu y Zn con relaciones máscas Cu/ZnO de 2 y 3 (Cu15ZnO7,5@HAG y Cu15ZnO5@HAG). Las reacciones se llevaron a cabo en un reactor de lecho fijo, utilizando 500 mg de catalizador (reducido in situ con hidrógeno a $300 \text{ }^\circ\text{C}$). Se usó una corriente de alimentación de 75 ml/min , con una composición del 16% CO, 32% H_2O y balanceada con N_2 , y temperaturas de entre $150 - 360 \text{ }^\circ\text{C}$. Con el catalizador Cu15@HAG se obtuvo la mayor conversión de CO (Figura 1) y un rendimiento a H_2 de 39,1%, a temperaturas superiores a $330 \text{ }^\circ\text{C}$. Al añadir ZnO, inicialmente la conversión de CO disminuye, pero a medida que aumenta la carga de éste, la conversión aumenta, debido, posiblemente, a la mejor dispersión y estabilidad del Cu. El catalizador Cu15@HAG tiene una conversión cercana al equilibrio termodinámico, a temperaturas superiores a $300 \text{ }^\circ\text{C}$.

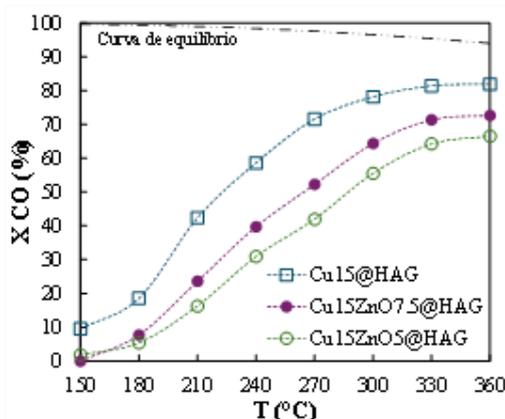


Figura 1. Conversión de CO en la reacción WGS en función de la temperatura de reacción para los diversos catalizadores.

Agradecimientos

Esta investigación ha sido financiada a través de los proyectos PID2022-140844OB-I00 y TED2021-131324B-C21 por [MCIN/AEI/10.13039/501100011033](https://doi.org/10.13039/501100011033) y por la Unión Europea "Next GenerationEU"/PRTR.

Catalizadores Pd/C preparados a partir de residuos de biomasa para producción y almacenamiento de hidrógeno

María Bernal-Vela*, Miriam Navlani-García, Diego Cazorla-Amorós

Departamento de Química Inorgánica e Instituto de Materiales, Universidad de Alicante, Ap 99, Alicante, E-03080, España

* maria.bernal@ua.es

Palabras clave: carbón activado, biomasa, catálisis, hidrógeno

El hidrógeno es una alternativa interesante a los combustibles fósiles, los cuales presentan limitaciones con respecto a la disponibilidad y los problemas ambientales derivados de su uso. Sin embargo, el hidrógeno presenta algunos problemas relacionados con su almacenamiento [1]. En este sentido, el almacenamiento químico de hidrógeno ha recibido gran interés y, en particular, el ácido fórmico (HCOOH), molécula portadora de hidrógeno clasificada dentro de los conocidos como LOHCs (acrónimo del inglés "Liquid Organic Hydrogen Carriers"), es una opción muy interesante debido a sus propiedades (estado líquido a temperatura ambiente, baja toxicidad, facilidad de manipulación, etc.) [2]. Los catalizadores de Pd soportado en materiales carbonosos son los más usados en la deshidrogenación del ácido fórmico para producir hidrógeno [3]. Existen numerosos estudios en los cuales se indica el efecto positivo de la incorporación de grupos nitrogenados en el soporte en el comportamiento final de dichos materiales. Estos soportes son frecuentemente sintetizados en múltiples pasos, por lo que el desarrollo de un procedimiento más simple y sostenible es un objetivo muy atractivo.

En este estudio, se han sintetizado catalizadores basados en nanopartículas de Pd soportadas en carbón activado, el cual se ha preparado a partir de residuos de biomasa, concretamente cáscara de almendra. El carbón activado fue preparado por carbonización hidrotermal (HTC) seguido de un tratamiento térmico a 900 °C. Los soportes dopados con nitrógeno fueron sintetizados añadiendo dicianodiamida a la disolución usada en HTC, omitiendo así un paso en la síntesis con respecto a otros métodos de síntesis en los cuales se incorpora el nitrógeno en una etapa posterior a la síntesis del carbón activado. Los catalizadores de Pd se prepararon por impregnación en exceso de humedad. La actividad catalítica de estos materiales fue probada en la reacción de deshidrogenación del ácido fórmico. Los resultados muestran el efecto positivo de la incorporación de nitrógeno en el soporte, ya que los catalizadores con nitrógeno presentan una mejor actividad catalítica y estabilidad que los catalizadores sin nitrógeno. Este estudio confirma la viabilidad del procedimiento usado para la preparación de los catalizadores, involucrando menos pasos experimentales que en las síntesis convencionales, siendo por tanto un procedimiento de síntesis muy interesante.

Agradecimientos

Este trabajo es parte del proyecto de I+D+i PID2021-123079OB-I00 financiado por [MCIN/AEI/10.13039/501100011033](#) y por FEDER/UE.

Referencias

- [1] Chaparro-Garnica, J.; Navlani-García, M.; Salinas-Torres, D.; Morallón-Núñez, E. and Cazorla-Amorós, D. "Highly Stable N-Doped Carbon-Supported Pd-Based Catalysts Prepared from Biomass Waste for H₂ Production from Formic Acid," *ACS Sustain Chem Eng*, 8 (2020) 15030–15043.
- [2] Navlani-García, M.; Salinas-Torres, D. and Cazorla-Amorós, D. "Hydrogen production from formic acid attained by bimetallic heterogeneous PdAg catalytic systems," *Energies* 12 (2019).
- [3] Navlani-García, M.; Mori, K.; Kuwahara, Y. and Yamashita, H. "Recent strategies targeting efficient hydrogen production from chemical hydrogen storage materials over carbon-supported catalysts," *NPG Asia Materials* 10 (2018) 1884-4057.

Hidroformulación de 1-octeno utilizando catalizadores de Rh soportados sobre materiales de base carbonosa sostenibles

C. M. Giménez-Eiras*, J. Torres-Liñán, M. J. Valero-Romero, J. Rodríguez-Mirasol, T. Cordero

Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Málaga, Campus de Teatinos s/n, 29010 Málaga, España

* carlosgimenezzeiras@uma.es

Palabras clave: hidroformilación, aldehídos, carbones activos, sostenibilidad

La hidroformilación es una reacción de gran interés industrial por la que, a partir de olefinas y gas de síntesis, se obtienen aldehídos, compuestos muy demandados para la producción de resinas, solventes o productos farmacéuticos. A escala industrial, la reacción tiene lugar en fase homogénea utilizando complejos de cobalto o rodio junto con ligandos de fósforo [1]. Sin embargo, estos catalizadores homogéneos requieren de costosos procesos de separación de los productos [2]. Es por ello, que resulta de gran interés la heterogeneización de dichos catalizadores, más fáciles de separar del medio de reacción y que eviten vertidos de fósforo y metales de elevado coste al medio ambiente.

En este trabajo se propone utilizar distintos carbones activos con distintos heteroátomos en su superficie (P, N, Mg) como soportes catalíticos de Rh en la reacción de hidroformilación de 1-octeno para producir aldehídos (nonanal y 2-metiloctanal). Los carbones activos utilizados como soportes se han preparado mediante activación química de hueso de aceituna (HA) y lignina residual (L) con H_3PO_4 (relación H_3PO_4 :HA/L de 2 o 3; 500 u 800 °C durante 2 h en N_2). Al soporte carbonoso se le depositó, por humedad incipiente, $RhCl_3$ (-Cl) o $Rh_2(Ac)_4$ (-Ac), en una relación P/Rh = 15, y se trató durante 2 h a 250 °C en atmósfera inerte (indicado con N_2) o con 10% de H_2 (indicado con H_2). Los experimentos de hidroformilación se realizaron en un reactor semicontinuo a presión con gas de síntesis ($H_2/CO = 1$) y una relación molar 1-octeno/Rh de 4400, durante 4 h a 70 °C y 40 bar.

Todos los soportes carbonosos presentan un elevado volumen de mesoporo (0,6-1,1 cm^3/g) permitiendo la amplia dispersión de la fase metálica y una reducción de los problemas difusionales en el medio de reacción. El catalizador L3500Rh-Ac(N_2) muestra una elevada conversión, asociada a un mejor acceso a los sitios activos por su mayor volumen de mesoporos, la presencia de Mg y el elevado contenido de P, que parecen favorecer la selectividad hacia los aldehídos ramificados y la formación de ácido nonanoico. Por otra parte, los catalizadores de Rh soportados sobre los carbones activados de HA con H_3PO_4 presentan en general una conversión superior al 60% y una relación entre el aldehído lineal y el ramificado ($I/b = 2, 1-2,3$) similar al que se obtiene con el catalizador en fase homogénea $RhH(CO)(PPh_3)_3$ ($I/b = 2,5$) [1]. El tratamiento con hidrógeno favorece la conversión de 1-octeno.

Tabla 1. Hidroformilación de 1-octeno con distintos sistemas catalíticos.

Catalizador	X _{1-octeno} (%)	S _{Nonanal} (%)	S _{Ramificado} (%)	S _{Olefinas C8} (%)	I/b
HA2800Rh-Cl(H_2)	61.1	29.4	12.6	13.3	2.3
HA3800Rh-Cl(H_2)	72.3	55.3	26.5	18.2	2.1
HA3800Rh-Ac(H_2)	72.1	53.5	25.3	21.1	2.1
HA3800Rh-Ac(N_2)	59.5	59.4	26.3	14.0	2.3
L3500Rh-Ac(N_2)	89.6	39.9	36.4	1.4	1.1

Agradecimientos

Los autores agradecen al MCINN por la concesión del proyecto CNS2022-135418 para incentivar la consolidación investigadora, financiado por los fondos NextGeneration de la Unión Europea.

Referencias

- [1] Sartipi, S. et al., "Dynamic release-immobilization of a homogeneous Rhodium hydroformylation catalyst by a polyoxometalate metal-organic framework composite", *ChemCatChem* 7, (2015) 3243-3247.
- [2] Lan, Y. et al., "Containing nitrogen and phosphorus porous organic polymer-supported rhodium catalyst for hydroformylation of olefins", *Catalysis Letters* 154, (2024) 3911-3923.

Transformación de productos derivados del alquitrán de hulla de bajo valor en carbones activados químicamente

S. González-Martínez*, A. Castro-Muñiz, M. Villanueva-Gutiérrez, F. Suárez-García, J.I. Paredes-Machón

Instituto de Ciencia y Tecnología del Carbono (INCAR), Oviedo

* sara.gonzalez@incar.csic.es

Palabras clave: polímeros hipercruzados, activación química, carbones porosos, adsorción, energía

Introducción

En este trabajo, se investigó el uso de una serie de productos derivados del alquitrán de carbón (CTPs) (destilados de alquitrán constituidos por mezclas complejas de hidrocarburos aromáticos policíclicos) para la preparación de polímeros hipercruzados (HCPs). Los HCPs se carbonizaron y, tras una activación química, se obtuvieron carbones que presentan una óptima textura porosa para la eliminación de compuestos aromáticos en aguas (fenol), y para ser utilizados en dispositivos de almacenamiento de energía.

Experimental

Los HCPs se obtuvieron mediante la reacción de alquilación de Friedel-Crafts en un solo paso, utilizando diferentes CTPs como precursores, FeCl_3 como catalizador y formaldehído dimetilacetal como agente entrecruzante. Los HCPs obtenidos se carbonizaron en un horno horizontal a $850\text{ }^\circ\text{C}$ una hora en atmósfera inerte y posteriormente se activan químicamente con KOH a $850\text{ }^\circ\text{C}$ durante una hora en las mismas condiciones y utilizando una proporción en peso de 2:1 (KOH:carbón). Finalmente, los carbonizados se lavaron con HCl.

La capacidad total de adsorción de fenol de los carbones activados se obtuvo agitando las muestras en una solución acuosa concentrada de fenol (2 g/L) durante 24 horas a $25\text{ }^\circ\text{C}$.

Además, se realizaron estudios electroquímicos mediante experimentos de voltamperometría cíclica y ciclado galvanostático utilizando los carbones como material activo (cátodo) en condensadores híbridos de ion zinc.

Resultados y discusión

Las áreas de superficie específica BET (S_{BET}) de los carbones oscilaron entre $934\text{ m}^2/\text{g}$ y $1776\text{ m}^2/\text{g}$ y se observó que, cuanto mayor es el volumen de microporos estrechos, obtenido a partir de la adsorción de CO_2 (V_{CO_2}), más fenol adsorben los carbones activados. Las diferencias en sus texturas porosas y rendimientos se atribuyen a las características variadas de los HCPs.

Respecto al análisis electroquímico, se obtienen capacidades de hasta 113 mAh/g , lo esperado para carbones que presentan dicha porosidad.

Agradecimientos

Este proyecto ha recibido financiación del Research Fund for Coal and Steel (RFCS) de la Unión Europea (UE) en virtud del acuerdo de subvención nº 101033964. También agradecemos a Bilbaína de Alquitrán S.A. el suministro de los CTP utilizados en este trabajo.

Referencias

- [1] Cha, J. S. et al. Production and utilization of biochar: A review. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry* 40, 1–15 (2016).
- [2] Ben Mosbah, M., Mechi, L., Khiari, R. & Moussaoui, Y. Current State of Porous Carbon for Wastewater Treatment. *Processes* 8, 1651 (2020).

Preparación de catalizadores fibrilares ácidos de base carbonosa para la deshidratación de metanol a olefinas

M. Guerrero-Alba*, F. J. García-Mateos, R. Ruiz-Rosas, J. M. Rosas, J. Rodríguez- Mirasol, T. Cordero

Universidad de Málaga, Andalucía Tech, Departamento de Ingeniería Química, Escuela de Ingenierías Industriales, Campus de Teatinos s/n, 29071 Málaga, España.

* martaguerrero@uma.es

Palabras clave: catalizadores fibrilares, lignina, metanol, olefinas

La reacción de deshidratación de metanol como ruta alternativa para la obtención de olefinas, requiere el uso de catalizadores con carácter ácido, siendo uno de los más investigados la zeolita ZSM-5. El principal reto que presenta el uso de este catalizador es su pronta desactivación, lo que lleva a una disminución en la selectividad a olefinas. En este trabajo, se ha estudiado el desarrollo de diferentes catalizadores fibrilares ácidos de base carbonosa para mejorar la estabilidad de la reacción de deshidratación de metanol hacia olefinas.

Los catalizadores se han preparado mediante electrohilado de disoluciones de lignina/etanol/fase ácida. Como precursores de la fase ácida se han usado zeolita ZSM-5, H_3PO_4 o $H_3PO_4-ZrO(NO_3)_2$, cuyas relaciones másicas han sido 1/1/0,12, 1/1/0,2 y 1/1/0,2-0,04, respectivamente. Las fibras resultantes han sido estabilizadas en atmósfera oxidante y carbonizadas en atmósfera inerte a 500 o 900 °C. La actividad catalítica en la reacción fue evaluada en un reactor de lecho fijo vertical a presión atmosférica y a 450 °C con una concentración de metanol del 20% v/v y un tiempo espacial de $25 \text{ mg}_{\text{cat}} \cdot \text{s} \cdot \mu\text{mol}^{-1}$.

Los catalizadores son esencialmente microporosos, mostrando superficies específicas de hasta $1300 \text{ m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$ y con una acidez específica variable entre $0,21-0,55 \text{ mmolNH}_3 \cdot \text{g}^{-1}$ (Tabla 1). El catalizador que ha presentado mejores resultados de actividad ha sido el catalizador fibrilar con la zeolita dispersa, presentando un 100% de conversión de metanol con selectividades a olefinas superiores al 60% durante los 150 primeros minutos de reacción (Figura 1). Después, comienza la formación de DME, presentando una selectividad a este de más del 70%.

Tabla 1. Parámetros texturales y acidez de los catalizadores.

Catalizador	A_{BET} $\text{m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$	V_p $\text{cm}^3 \cdot \text{g}^{-1}$	V_{DR} $\text{cm}^3 \cdot \text{g}^{-1}$	Acidez $\text{mmolNH}_3 \cdot \text{g}^{-1}$
PCF-500	467	0.20	0.23	0.35
PCF-900	1296	0.60	0.37	0.47
PZrCF-500	41	0.03	0.17	0.55
PZrCF-900	1037	0.42	0.33	0.43
CF-ZSM5-500	488	0.21	0.19	0.21

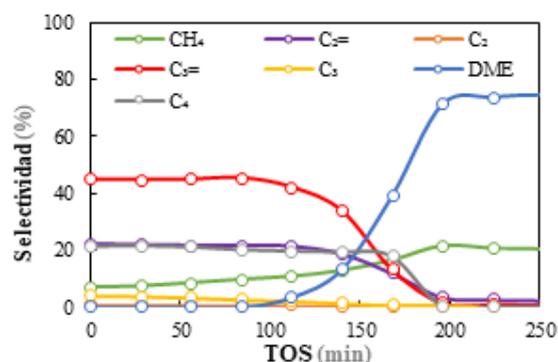


Figura 1. Evolución de la selectividad de los productos empleando el catalizador CF-ZSM5-500.

Agradecimientos

Los autores agradecen el apoyo económico al MCIN (PID2022-140844OB-I00 y TED2021-131324B-C21) y a la UE "NextGenerationEU"/PRTR ([MCIN/AEI/10.13039/501100011003](https://doi.org/10.13039/501100011003)).

New trends in modelling of breakthrough curves to remove pollutants using adsorption on advanced monoliths geometries

Saúl O. Gutiérrez-Reyna^{*1}, E.C. Herrera-Hernández¹, Carlos G. Aguilar-Madera², M.Victoria López-Ramón³, Raúl Ocampo-Pérez¹, Adriana Parra-Marfil^{1,4}, Elías García-Hernández¹, Esther Bailon-García⁴

¹ Centro de Investigación y Estudios de Posgrado, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, San Luis Potosí, 78260, México

² Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias de la Tierra, Carretera a Cerro Prieto Km 8, Ex-Hacienda de Guadalupe, 67700, Linares, México

³ Departamento de Química Inorgánica y Orgánica, Facultad de Ciencias Experimentales, Universidad de Jaén, Jaén, 23071, Spain

⁴ Grupo de Investigación en Materiales del Carbón, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada, Campus Fuente Nueva s/n., 18071, Granada, Spain

* sg447722@gmail.com

En un mundo donde la escasez de agua limpia se vuelve cada vez más preocupante, la búsqueda de soluciones innovadoras para combatir la contaminación del agua es crucial. Los métodos tradicionales de filtrado y purificación ya no son suficientes para eliminar la creciente variedad de contaminantes emergentes, como productos farmacéuticos, pesticidas y productos químicos industriales.

El desarrollo de sectores como el farmacéutico, textil y alimenticio ha generado un aumento en la presencia de estos contaminantes, los cuales, debido a su baja concentración en el pasado, no representaban un problema significativo. Sin embargo, ahora suponen una amenaza para la salud humana y el medio ambiente.

Para abordar este desafío, el proceso de adsorción en lecho fijo ha ganado relevancia debido a sus numerosas ventajas: alta eficiencia y selectividad, amplio rango de aplicación, operación simple, flexibilidad, baja generación de residuos y escalabilidad. En este proceso, el agua contaminada fluye a través de un material adsorbente con una alta superficie interna, donde los contaminantes se adhieren y se eliminan del agua.

Si bien la adsorción en lecho fijo presenta grandes beneficios, aún existen desafíos importantes que abordar como el aprovechamiento incompleto del material adsorbente, esto debido a que la deposición de contaminantes no es instantánea, y a medida que la superficie del material se satura, la eficiencia del proceso disminuye. Lo que obliga a que la sección de adsorción se desplace gradualmente dentro de la columna, hasta que alcanza el límite y deba ser retirada de operación.

En este trabajo se propone optimizar la distribución de los contaminantes adsorbidos para aumentar el aprovechamiento del material adsorbente, lo que se propone modificar la geometría de los lechos fijos. Utilizando el proceso de cera perdida, y la impresión en 3D para la fabricación de los diseños de monolitos de carbono a partir de una solución de resorcinol-formaldehído.

La impresión 3D permitió utilizar modelos computarizados del monolito para realizar simulaciones previas, anticipando la distribución del contaminante y la saturación del material. Esto ahorró tiempo y recursos, permitiendo enfocarse en las geometrías más prometedoras.

La combinación de impresión 3D y adsorción en lecho fijo con monolitos de carbono ofrece una solución innovadora y eficiente para combatir la contaminación del agua emergente. Esta tecnología tiene el potencial de transformar la forma en que purificamos el agua y garantizar un acceso equitativo a agua limpia para las generaciones venideras [1].

Referencias

[1] S. O. Gutiérrez-Reyna et al., "New trends in modelling of breakthrough curves to remove pollutants using adsorption on advanced monoliths geometries", *Environ Res*, vol. 243, p. 117871, Feb. 2024, doi: [10.1016/J.ENVRES.2023.117871](https://doi.org/10.1016/J.ENVRES.2023.117871).

Membranas de óxido de grafeno para la nanofiltración de fármacos

G.S. Live-Lozada^{*1}, J.A. Baeza^{1,2}, L. Calvo^{1,2}, N. Alonso-Morales^{1,2}, M.A. Gilarranz^{1,2}

¹ Departamento de Ingeniería Química, Universidad Autónoma de Madrid, 28049 Madrid.

² Instituto de Investigación Avanzada en Ciencias Químicas (IAdChem), Universidad Autónoma de Madrid, 28049 Madrid.

* gabriela.live@uam.es

Palabras clave: óxido de grafeno, nanofiltración, membranas, contaminantes emergentes

El óxido de grafeno (GO) es un nanomaterial que ha generado gran interés en los últimos tiempos gracias a sus propiedades únicas. Entre sus múltiples aplicaciones destaca su uso para la formación de membranas para el tratamiento de aguas. Estas membranas resultan especialmente interesantes en el tratamiento de fármacos [1], compuestos incluidos en los denominados contaminantes de preocupación emergente. Estos compuestos presentan dificultades en su eliminación mediante los tratamientos convencionales, por lo que las membranas de óxido de grafeno se han presentado como una gran alternativa para este propósito. Por todo ello, en este trabajo se han preparado membranas de GO mediante filtración a vacío controlado (100 hPa) [2] y se han utilizado en la nanofiltración del fármaco ciprofloxacino (10 mg L⁻¹) en un equipo comercial a 2 bar con control de la temperatura (Benchtop Cross Flow Filtration System, Sterlitech), usando una celda con un área efectiva de 15,2 cm².

Se han evaluado diferentes condiciones de operación: velocidad lineal (1,0 - 2,5 m s⁻¹) y presiones (2 - 20 bar) con una membrana formada con 600 mg m⁻² de GO. Las membranas mostraron una buena estabilidad en todas las condiciones evaluadas, sin observarse deformaciones o fracturas. En el caso de 2 bar y 2 m s⁻¹ se obtuvieron valores de permeabilidad y rechazo de 0,4 L h⁻¹ m⁻² bar⁻¹ y 91%, respectivamente. Además, estos resultados se compararon con los obtenidos en una celda de filtración de metacrilato realizada en el laboratorio (área de 4 cm²), donde se obtuvieron retenciones del 78% con permeabilidades de 1,1 L h⁻¹ m⁻² bar⁻¹. También, se analizó la influencia de la cantidad de GO empleada en la formación de la membrana (200 - 600 mg m⁻²) con las condiciones de 2 bar de presión. Los tiempos de formación de la membrana se vieron significativamente afectados por la cantidad de GO empleado, variando de 90 a 5 min. Esto influye en el mecanismo de formación de la membrana, en el que las láminas de GO se someten principalmente a dos etapas: una primera etapa de formación de lamelas de GO y una segunda etapa de compactación de las mismas. La membrana obtenida con menor cantidad, con unos 30 - 40 nm de espesor presentó una buena estabilidad en filtración, logrando los mejores resultados, con un equilibrio óptimo entre permeabilidad y rechazo, alcanzando valores de 1,3 L h⁻¹ m⁻² bar⁻¹ y 61%, respectivamente. Los ensayos de larga duración realizados (72 h) mostraron una alta estabilidad de las membranas, manteniendo el rechazo en valores superiores al 50%.

Referencias

[¹] Han, S., Jun, B., Choi, J. S., Park, C. M. Jang, M., Nam, S., Yoon, Y.; Removal of endocrine disruptors and pharmaceuticals by graphene oxide-based membranes in water: A review, *Journal of Environmental Management* 363 (2024) 121437.

[²] Fernández-Márquez, M., Pla, R., Oliveira, A. S., Baeza, J. A., Calvo, L., Alonso-Morales, N., Gilarranz, M. A.; Improvement of water filtration performance of graphene oxide membranes on Nylon support by UV-assisted reduction treatment: Control of molecular weight cut-off, *Chemical Engineering Journal* 449 (2022) 137807.

Carbón grafítico como soporte catalítico en la hidroisomerización selectiva de hexadecano

J. López-de los Ríos*, C. Di Stasi, D. Torres, J.L. Pinilla, I. Suelves

Instituto de Carboquímica (ICB), CSIC, C/ de Miguel Luesma Castán, 4, 50018 Zaragoza

*jlopez@icb.csic.es

Palabras clave: carbono grafítico, catalizadores bifuncionales, hidroisomerización de alcanos

La isomerización de alcanos es un proceso clave en la obtención y la mejora de combustibles con propiedades específicas como los combustibles de aviación (jet fuel) que se obtienen a partir de ceras de Fisher-Tropsch. Éste se lleva a cabo con el empleo de catalizadores bifuncionales capaces de realizar simultáneamente procesos de hidrogenación/deshidrogenación (empleando metales nobles como Pt y Pd) y la modificación estructural de la molécula (isomerización), llevada a cabo por sitios ácidos de Brønsted presentes en el soporte catalítico [1]. Aunque los soportes más empleados son zeolitas y fosfato silicoaluminoso (SAPO), los nanomateriales de carbono representan una alternativa interesante a los mismos. Propiedades importantes como la acidez y la porosidad pueden ajustarse en estos nanomateriales mediante tratamientos físico-químicos.

Este trabajo tiene como objetivo desarrollar un catalizador activo y selectivo en la isomerización de hexadecano, utilizando el carbono grafítico obtenido de la descomposición catalítica de metano como soporte. Además, se adiciona sílica-alúmina comercial como estrategia para incrementar la acidez del mismo y Pt o Pd como sitios metálicos activos. La isomerización de hexadecano se realiza en un reactor batch con H₂ a 40 bar de presión inicial, analizándose el impacto de la temperatura, el tiempo de reacción y la influencia del soporte sobre la conversión y selectividad a isómeros.

Como se muestra en la Fig. 1, el catalizador de Pt es más activo y selectivo que el de Pd. Incrementando la temperatura de 250 a 400 °C se mejora la conversión y el craqueo del hexadecano, mientras que alargando el tiempo de reacción mejoran tanto la conversión como la selectividad a isómeros.

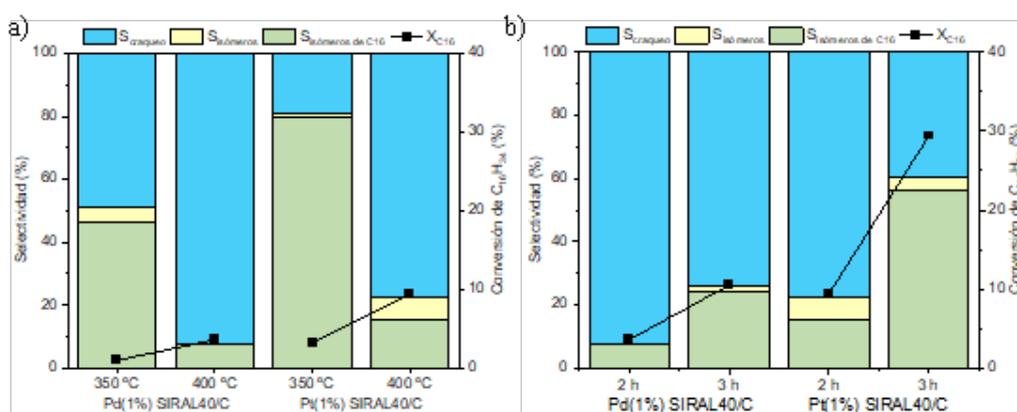


Figura 1. Conversión de hexadecano (C₁₆) y selectividad a craqueo, isómeros de C₁₆ y al resto de isómeros en la hidroisomerización de hexadecano, a) estudio de la temperatura (350 y 400 °C) para 2 h de reacción, b) estudio del tiempo de reacción (2 y 3 h) a 400 °C.

Agradecimientos

Los autores agradecen a [MCIN/AEI/10.13039/501100011033](#) y la UE "NextGenerationEU"/PRTR" por la financiación recibida a través del proyecto TED2021-131416B-I00. JLR agradece a la DGA por su contrato predoctoral.

Referencias

[1] C. Wei, G. Zhang, L. Zhao, J. Gao, C. Xu, Effect of metal–acid balance and textual modifications on hydroisomerization catalysts for n-alkanes with different chain length: A mini-review, *Fuel*. 315 (2022) 122809.

Efecto de distintos tratamientos químicos en la capacidad de biosorción de materiales carbonosos derivados de residuos de la industria del cáñamo

E. Muñiz*, P. Díaz, M. Díaz-Somoano

Grupo de Metales y Medioambiente, Departamento de Procesos Químicos Sostenibles, Instituto de Ciencia y Tecnología del Carbono (INCAR), CSIC, Oviedo

* e.muniz@incar.csic.es

Palabras clave: biosorción, colorantes, cáñamo, tratamiento de aguas

La expansión demográfica, las sequías y el difícil acceso a agua potable en algunas zonas del mundo hacen que la búsqueda de soluciones para la descontaminación de las aguas sea prioritaria. Entre los contaminantes más difíciles de eliminar se encuentran los colorantes, como el Azure B (AB), el Verde Malaquita (VM) o el Rojo Congo (RC), empleados habitualmente en la industria textil a pesar de su carácter tóxico y mutagénico [1]. Una de las técnicas de remediación ambiental que mejores resultados proporciona frente a este tipo de contaminantes es la adsorción, que en los últimos años ha evolucionado hacia alternativas más sostenibles como el uso de materiales lignocelulósicos como adsorbentes [2]. Por ello, para este trabajo se ha seleccionado uno de los residuos con mayor contenido en lignina de la industria alimentaria del cáñamo, las cáscaras de semilla (HSS), para evaluar su potencial como adsorbente en procesos de tratamiento de aguas contaminadas con colorantes.

El principal objetivo de este trabajo es analizar el efecto que diferentes tratamientos químicos, recogidos previamente en bibliografía [3-4], tienen en la capacidad de biosorción de HSS frente a los colorantes mencionados anteriormente. Para ello, las cáscaras se trataron con NaOH al 5% (HSS-MER) o con ácido cítrico al 5% (HSS-CA). Los materiales obtenidos, junto con las cáscaras lavadas solo con agua (HSS-WW), fueron caracterizadas mediante diversas técnicas. Posteriormente, los distintos materiales se testaron en ensayos de adsorción empleando disoluciones acuosas de AB, VM o RC.

Los resultados de esta investigación demuestran el potencial de las cáscaras de semilla cáñamo para la eliminación de colorantes en aguas. Tras el tratamiento básico, HSS-MER presenta un mayor número de grupos oxigenados, asociados a la presencia de celulosa, que mejoran las capacidades de biosorción del material frente AB y VM, alcanzando valores próximos al 97%. HSS-CA y HSS-WW parecen ser más efectivos para la biosorción de CR que el material tratado con NaOH, lo que está estrechamente ligado con la presencia de grupos sulfonatos en la estructura del colorante.

Agradecimientos

Las autoras agradecen a las empresas Cáñamo Valley y Sr. Valley Hemp Foods (Asturias) la cesión de los residuos de cáñamo derivados de su actividad y a FICYT la financiación recibida (AYUD/2021/51379 y AYUD/2021/57543). E.M.G. agradece la ayuda al “Programa Investigo” del “Plan de Recuperación, Transformación y Resiliencia” financiado por la Unión Europea – NextGenerationEU.

Referencias

- [1] Lellis, B. et al., “Effects of textile dyes on health and the environment and bioremediation potential of living organisms”, *Biotech. Res. Innov.* vol 3. (2019) 275-290.
- [2] Supanchaiyamat, N. et al., “Lignin materials for adsorption: Current trend, perspectives and opportunities”, *Biores. Technol.* vol 272. (2019) 570-581.
- [3] Kabir, M.M., et al., “Effects of chemical treatments on hemp fibre structure”, *Appl. Surf. Sci.* vol 276. (2013) 13-23.
- [4] Sajab, M.S., et al., “Citric acid modified kenaf core fibres for removal of methylene blue from aqueous solution”, *Biores. Technol.* vol 102. (2011) 7237-7243.

Sensores electroquímicos basados en nanotubos de carbono modificados con nanopartículas bimetálicas Au/Cu

Marian Adeyemi*¹, A.F. Quintero-Jaime¹, Ángel Berenguer-Murcia², Diego Cazorla-Amorós², Emilia Morallón¹

¹ Department of Physical Chemistry and University Institute of Materials (IUMA), University of Alicante, Ap. 99, 03080, Alicante, Spain

² Department of Inorganic Chemistry and University Institute of Materials (IUMA), University of Alicante, Ap. 99, 03080, Alicante, Spain

* marian.adeyemi@ua.es

Palabras clave: CNTs, nanopartículas de Oro-Cobre (Au/Cu), biosensores, voltametría cíclica

Los nanotubos de carbono (CNTs) son materiales excepcionales para aplicaciones en sensores debido a su alta conductividad eléctrica, gran área superficial y resistencia mecánica, convirtiéndolos en soportes ideales para sensores y biosensores, especialmente de tipo electroquímico [1]. En este sentido, sus propiedades pueden ser adaptadas mediante procesos de modificación superficial o mediante la fabricación de materiales híbridos que exhiben propiedades electrocatalíticas superiores para la detección de analitos de interés. Las nanopartículas bimetálicas, tales como las nanopartículas de oro-cobre (Au/Cu), ofrecen ventajas únicas sobre las nanopartículas mono-metálicas, incluyendo propiedades ajustables, actividad catalítica mejorada y efectos sinérgicos entre los metales [2].

La incorporación de las nanopartículas bimetálicas en los nanotubos de carbono de pared múltiple funcionalizados (fMWCNTs) se ha realizado *in-situ* durante la síntesis de las nanopartículas bimetálicas Au/Cu. Esta modificación del material carbonoso incrementa la cinética del proceso de transferencia de electrones y el área superficial electroquímicamente activa, lo que conduce a un rendimiento superior del sensor.

Técnicas de caracterización como la microscopía electrónica de transmisión confirman la fijación de nanopartículas sobre el soporte carbonoso. Así mismo, los perfiles voltamétricos de los materiales sintetizados demuestran que el comportamiento electroquímico y la actividad redox superficial varía con respecto a la proporción Au/Cu de las nanopartículas. En este sentido, los MWCNTs modificados con nanopartículas de Au/Cu muestran actividad electrocatalítica hacia varios analitos de interés biológico, como el peróxido de hidrógeno, demostrando sus capacidades de detección y aplicabilidad como sensores electroquímicos. Sus propiedades combinadas los hacen particularmente adecuados para crear plataformas de detección no enzimáticas con alta sensibilidad y selectividad mejorada en comparación con los materiales de sensores convencionales.

Agradecimientos

Los autores agradecen a la Generalitat Valenciana, Conselleria de Educación, Cultura, Universidades y Empleo (GVANEXT-Fons Next Generation UE, INVEST/2022/267).

Referencias

[1] D.C. Ferrier, K.C. Honeychurch, "Carbon Nanotube (CNT)-Based Biosensors", *Biosensors (Basel)* 11 (2021) 486.

[2] B. Kłębowski, J. Depciuch, M. Parlińska-Wojtan, J. Baran, "Applications of Noble Metal-Based Nanoparticles in Medicine", *Int J Mol Sci*, (2018).

Estudio de la tendencia a la aglomeración y la producción de CO de transportadores de oxígeno para Chemical Looping CO₂ Splitting

Alberto O. Garcia-Dominguez*, Arturo Cabello, Francisco Garcia-Labiano, María T. Izquierdo, Luis F. de Diego

Instituto de Carboquímica (ICB-CSIC), Departamento de Energía y Medioambiente. Miguel Luesma Castán, 4, 50018 Zaragoza

* agarcia@icb.csic.es

Palabras clave: transportadores de oxígeno, aglomeración, CO₂ Splitting, biocombustibles

Para acabar con la problemática de las emisiones de CO₂ a la atmósfera, la UE puso en marcha el Pacto Verde Europeo para pasar de una economía basada en combustibles fósiles a otra basada en hidrógeno. A corto plazo, esto no es posible en el campo de la aviación, por lo que se ha optado por la producción de e-fuels como el bio-queroseno. En este trabajo, se propone un nuevo proceso, denominado como Chemical Looping CO₂ Splitting (CLCO2SPLIT), para obtención de CO a partir de CO₂ e H₂ verde como ruta para la producción de biocombustibles para la aviación a través del proceso de síntesis Fischer-Tropsch (F-T). El desarrollo de un transportador de oxígeno (TO) adecuado es uno de los aspectos clave para el proceso CLCO2SPLIT. Este TO debe tener una buena resistencia mecánica, alta reactividad y conversión, así como una baja tendencia a la aglomeración. Estudios previos muestran que los TOs basados en óxidos de hierro son los materiales más prometedores. En la Fig. 1 se muestra un esquema del proceso CLCO2SPLIT y las reacciones redox que tienen lugar en cada reactor.

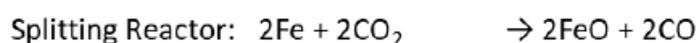
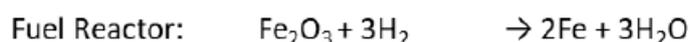
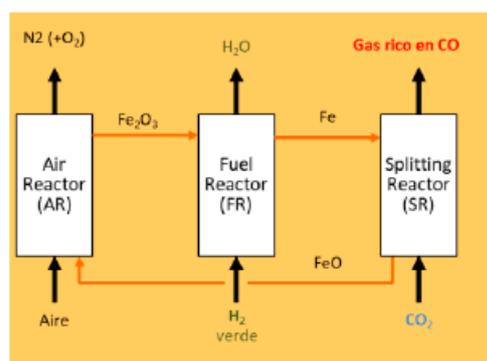


Figura 1. Esquema del proceso CLCO2SPLIT y las reacciones implicadas.

En primer lugar, minerales basados en óxidos de hierro se sometieron a ciclos de reducción (H₂)-oxidación (CO₂-aire) en un reactor de lecho fluidizado discontinuo (RLFD), pero éstos aglomeraron a los pocos ciclos de operación. Por ello, se optó por sintetizar materiales nuevos basados en una mezcla de Fe₂O₃ y otros óxidos metálicos como soporte (ZrO₂, MgO, TiO₂ y MgAl₂O₄) y, tras un proceso de selección que evaluaba su reactividad en TGA y su resistencia a la rotura, se escogieron los más prometedores [1]. A continuación, los cinco candidatos seleccionados fueron testeados en el RLFD aglomerando tres de ellos por lo que los dos materiales restantes, Zr/Fe y ZrMg/Fe, fueron seleccionados para llevar a cabo la prueba de concepto del proceso CLCO2SPLIT en una planta en continuo recientemente construida en el Instituto de Carboquímica (ICB-CSIC).

Referencias

[1] Garcia-Dominguez A. O., Cabello A., Garcia-Labiano F., Izquierdo M. T., de Diego L. F., "Preliminary Screening of Materials for Chemical Looping CO₂ Splitting Process as a Pathway for Biokerosene Synthesis" Energy Fuels (2024), 38, 15410-15420.

Advances in Petrochemical Transformation: catalytic cracking of heavy petroleum with innovative kaolin-based geo-catalysts

Osamah Basil Mahmood^{1,2}, Mohammed Alzuhairi², Esther Bailón García¹, Francisco Carrasco-Marín¹, Juan Amaro-Gahete^{*1}

¹ *Materiales Polifuncionales Basados en Carbono (UGR-Carbon), Dpto. Química Inorgánica - Unidad de Excelencia Química Aplicada a Biomedicina y Medioambiente - Universidad de Granada (UEQ-UGR), ES18071 Granada, Spain*

² *Department of Materials Engineering, University of Technology, Baghdad 10069, Iraq*

**j.amarogahete@ugr.es*

Palabras clave: kaolin-based materials, catalysis, heavy hydrocarbons, petrochemical industry

The petrochemical industry plays a crucial role in converting heavy feedstocks, such as high molecular weight crude oils, into lighter, high-value distillates like gasoline, jet fuel, and diesel. These transformations not only enhance the economic value of raw materials but also support global energy demands and environmental compliance. Catalytic cracking, a core process in this industry, has benefited from the incorporation of kaolin, a naturally abundant aluminosilicate mineral. The layered structure of kaolin, composed of alternating silicon-oxygen tetrahedral and aluminum-oxygen-hydroxyl octahedral sheets, provides a robust framework that supports its catalytic capabilities.

Historically, kaolin was primarily used as a support material in Fluid Catalytic Cracking (FCC) due to its thermal stability and resistance to coke formation. However, recent advances have positioned kaolin as a stand-alone catalyst in petrochemical processes, including hydrocracking, isomerization, and zeolite synthesis. The low cost, abundant reserves, and adaptability of kaolin through modification make it a highly attractive material for catalysis. Modifications, such as acid and base activation or metal incorporation, have been shown to enhance the surface area, acidity, and catalytic efficiency of kaolin. These modifications allow kaolin-based catalysts to reduce reaction times, lower operating temperatures, and increase the production of valuable light distillates from heavy petroleum feedstocks.

Despite these advantages, challenges remain in optimizing the catalytic properties of kaolin, particularly regarding the cost and complexity of modification techniques. Ongoing research focuses on improving these processes to maximize economic viability while enhancing catalytic performance. Metal-enhanced kaolin catalysts, incorporating metals such as nickel, cerium, and cobalt, offer significant potential in increasing catalytic activity and selectivity, further advancing the transformation of heavy oils.

Future research will likely prioritize energy-efficient catalysts, cost-effective modification techniques, and sustainable practices such as recycling and reusability of catalysts. Moreover, exploring hybrid systems that combine kaolin with other materials may yield new opportunities for improving catalytic efficiency. With continued innovation, kaolin-based geo-catalysts have the potential to drive more efficient, sustainable, and economically viable petrochemical processes, contributing to the advancement of global energy solutions.

Referencias

[1] Jabar, T. A.; Alzuhairi, M. A.; Abed, M. S.; "Acidic Influence on Geopolymerization: A Thorough Study Using HCl and Iraqi Kaolin". *Russian Journal of Applied Chemistry* 97 (2024), 104–113.

Análisis de las propiedades del hidrochar obtenido mediante carbonización y licuefacción hidrotermal de purín de cerdo

B. Chiguano Tapia*, M.A. de la Rubia, A.F. Mohedano, E. Díaz

Departamento de Ingeniería Química, Universidad Autónoma de Madrid, 28049 Madrid, España

* bryan.chiguano@uam.es

Palabras clave: HTC, HTL, biocombustible, enmienda de suelos

Las tecnologías hidrotermales se presentan como una solución prometedora para valorizar residuos biomásicos transformándolos en un material carbonoso (hidrochar), con potencial para ser empleado en diversas aplicaciones [1]. El tratamiento hidrotermal de purín de cerdo (SM) (70% de humedad, 46,0% C, 12,9% de cenizas) se llevó a cabo en un intervalo de temperaturas comprendido entre 210 y 330 °C (PARR 4530 y 4570, Parr Instrument Company, USA), alimentando una corriente de purín al 10% en peso. El producto de reacción se separó con el fin de recuperar el hidrochar, la fracción acuosa (agua de proceso) y, en su caso, la fracción oleosa (biocrudo), esta última generada únicamente a las temperaturas más elevadas. Las principales características del hidrochar se muestran en la Tabla 1, junto con los límites establecidos por la norma ISO/TS 17225-8:2023 para su uso como combustible.

Tabla 1. Datos de hidrochar de purín de cerdo comparados con la norma ISO 17225-8:2023.

	Y _{HC} (%)	C (%)	N (%)	S (%)	VM (%)	Cenizas (%)	HHV (MJ/kg)
ISO 17225-8:2023	-	-	< 2,5	< 0,3	< 75	< 12	> 17
SM	-	49,0	1,7	0,4	80,2	12,9	16,2
HTC SM210	70,6	52,0	2,0	0,7	73,7	11,0	21,1
HTC SM240	59,3	57,9	2,1	0,8	64,3	14,5	24,1
HTL SM270	54,5	61,4	2,6	0,8	53,2	21,0	26,0
HTL SM300	50,8	61,5	2,5	0,7	52,5	16,4	25,6
HTL SM330	48,5	60,8	2,6	0,7	46,4	22,5	25,2

Adicionalmente, se evaluó el uso potencial del hidrochar como enmienda de suelo según los criterios establecidos en el Real Decreto 1051/2022 y 824/2024. Todos los hidrochar obtenidos cumplen con los requisitos marcados por la norma, presentando concentraciones de metales pesados inferiores al límite permisible (Cd < 10 mg/kg, Cu < 1 g/kg, Ni < 0,3 g/kg, Pb < 0,75 g/kg, Zn < 2,5 g/kg, Hg < 10 mg/kg, Cr < 1000 mg/kg, As < 40 mg/kg). Estos resultados resaltan la eficiencia del tratamiento hidrotermal de los purines de cerdo para obtener productos de valor añadido, apoyando una economía circular y reduciendo significativamente el impacto ambiental.

Agradecimientos

Los autores agradecemos el financiamiento otorgado por MCIN/AEI / 10.13039/501100011033 / FEDER, UE (PID2022-138632OB-I00). MCIN/AEI/10.13039/501100011033 y por la European Union "NextGenerationEU"/PRTR (TED2021-130287B-I00). B. Chiguano Tapia agradece el apoyo de MCIN/AEI y la beca de investigación PREP2022-000792.

Referencias

[1] Ipiates, R. P., Sarrion, A., Díaz, E., de la Rubia, M. A., Díaz-Portuondo, E., Coronella, C. J., & Mohedano, A. F. (2024). Swine manure management by hydrothermal carbonization: Comparative study of batch and continuous operation. *Environmental Research*, 245, 118062. <https://doi.org/10.1016/J.ENVRES.2023.118062>.

NewIronAge: el hierro como combustible en nuevos ciclos de almacenamiento de energía

A. Herrera*¹, S. Giménez¹, M.C. Mayoral¹, L.M. Romeo²

¹ Instituto de Carboquímica ICB-CSIC

² Instituto de Investigación en Ingeniería de Aragón (I3A). Departamento de Ingeniería Mecánica. Universidad de Zaragoza

* aherrera@icb.csic.es

Palabras clave: almacenamiento de energía, electrocombustible, hierro

Del mismo modo que el carbón o el petróleo se han transportado desde sus fuentes hasta los puntos de consumo durante décadas, el hierro metálico puede servir como combustible de alta densidad energética, con la evidente ventaja de no producir CO₂ en su oxidación y generando un óxido regenerable. La regeneración del óxido a Fe⁰ mediante un proceso industrial de reducción con H₂ de origen renovable permite el almacenamiento directo de energía en forma de hierro metálico, pudiendo transportarse posteriormente a los lugares donde existe una demanda de energía o utilizarse en momentos de consumo intensivo en calderas de combustión para la producción de electricidad o calor. De esta forma, el hierro metálico entra en la categoría de electrocombustible reciclable, también llamado “portador energético” [1]. El proceso de la combustión autosostenida del hierro ha sido estudiado y demostrado a escala laboratorio y planta piloto [2], sin embargo todavía persisten determinadas incertidumbres sobre el comportamiento de los materiales en ciclos realistas [3].

El proyecto NewIronAge [4] estudia la reacción de oxidación rápida en reactor continuo de flujo arrastrado y con el tamaño de partícula más realista para su implementación industrial en calderas de combustión, en el rango de 50-100 μm, lo que supone una novedad frente a estudios teóricos y a escala termobalanza. Además, se estudia el uso de fuentes de hierro alternativas y no únicamente hierro de calidad comercial que compita con la industria metalúrgica del acero. La etapa de regeneración de los óxidos producidos se simula mediante reducción en horno estacionario con hidrógeno como agente reductor. La caracterización de las partículas tras las sucesivas etapas se realiza mediante XRD, SEM-EDX, TGA y distribución de tamaños. Se presentan los resultados obtenidos en las condiciones adecuadas para asegurar la viabilidad de los ciclos de almacenamiento desacoplados.

Referencias

[1] Debiagi P. et al. Iron as a sustainable chemical carrier of renewable energy: Analysis of opportunities and challenges for retrofitting coal-fired power plants *Renew. Sust. Energ. Rev.* 165 (2022) 112579.

[2] Prasadha W et al. Towards an efficient metal energy carrier for zero-emission heating and power: Iron powder combustion. *Combustion and Flame* 268 (2024) 113655.

[3] Romeo LM, Mayoral MC, Jimenez S, Rubio B, Andrés. Energy storage using direct iron oxide reduction and energy utilization with high temperature metal combustion. *Proceedings of the 14th European Conference on Industrial Furnaces and Boilers (INFUB-14)*. 2-5 April 2024. Algarve, Portugal. ISBN: 978-989-35683-0-914 (PID2022-141372OB-I00).

Producción de hidrógeno mediante gasificación asistida con CaO de biomasa residual

Luis La Calle*, Isabel Martínez, Ramón Murillo

Grupo de Investigaciones Medioambientales, Instituto de Carboquímica (ICB-CSIC). C/Miguel Luesma Castán, 4, 50018, Zaragoza

* luislcc@icb.csic.es

Palabras clave: gasificación asistida con CaO (SEG), producción de hidrógeno verde, reactor desplazamiento de agua (WGS), craqueo catalítico de alquitranes

La gasificación es la ruta de conversión termoquímica más adecuada para transformar un combustible sólido como la biomasa en un gas de síntesis. Con el objetivo de producir un gas de síntesis rico en hidrógeno (H_2), la gasificación asistida con CaO (SEG, por sus siglas en inglés *Sorption Enhanced Gasification*) se presenta como la tecnología de gasificación con mejores prestaciones. En este proceso, la gasificación con vapor se realiza en presencia de un sorbente de base cálcica que reacciona con el CO_2 formado en las reacciones de gasificación mediante la reacción $CaO(s) + CO_2(g) \rightarrow CaCO_3(s)$. Como resultado, las reacciones de gasificación con vapor y de desplazamiento de agua (WGS, por sus siglas en inglés *Water Gas Shift*) se desplazan hacia la producción de H_2 . Además, la energía requerida para la gasificación con vapor es proporcionada por el calor liberado en la reacción exotérmica de carbonatación del CaO con el CO_2 , así como por el calor sensible de la corriente sólida (rica en CaO) a alta temperatura, procedente de un segundo reactor de combustión/calcinación. En este segundo reactor, el residuo carbonoso no convertido en el gasificador se quema utilizando aire u oxígeno para alcanzar la temperatura adecuada y calcinar el $CaCO_3$ formado en el reactor de gasificación [1].

El objetivo de esta investigación es estudiar la producción de hidrógeno en un proceso de gasificación asistida con CaO que incluye etapas de acondicionamiento del gas de síntesis basadas en el reformado de alquitranes y reformado de CO mediante WGS. Esta investigación se ha llevado a cabo en una planta piloto de gasificación a escala TRL 4-5 que incluye reactores catalíticos para la absorción de HCl, absorción de H_2S , reformado de alquitranes y WGS en el gas de síntesis producido en el gasificador con el fin de incrementar la producción de H_2 . Se ha utilizado hueso de aceituna como biomasa y se han estudiado variables tales como la temperatura en el gasificador (650-725 °C), la relación vapor/biomasa y la relación sorbente/biomasa alimentadas al gasificador. Los resultados obtenidos demuestran la posibilidad de alcanzar purezas de H_2 cercanas al 80 vol.% (base seca), posicionando este enfoque como una tecnología clave para la producción de hidrógeno verde. Esta investigación contribuye al desarrollo de soluciones energéticas limpias y sostenibles, esenciales para la transición hacia una economía basada en hidrógeno.

Referencias

[1] I. Martínez; M.S. Callén, G. Grasa, J.M. López, R. Murillo, "Sorption-enhanced gasification (SEG) of agroforestry residues: Influence of feedstock and main operating variables on product gas quality", *Fuel Processing Technology* vol.226 (2022) 107074.

Biocombustibles a partir de residuos industriales de biocolágeno del curtido vegetal mediante tecnologías de pirólisis siguiendo criterios de economía circular y sostenibilidad

L. Taboada-Ruiz*, E. Ciurcina, B. Ruiz, E. Fuente, P. Álvarez, M. Díaz-Somoano

Instituto de Ciencia y Tecnología del Carbono (INCAR), CSIC. 33011 Oviedo, España.

* l.taboada@incar.csic.es

Palabras clave: residuos biocolagénicos, pirólisis convencional/flash, biocombustibles, bioenergía

La transición energética hacia un modelo más sostenible se basa en la economía circular, la eficiencia energética, la integración de las energías renovables, el uso de combustibles sintéticos y la electrificación de la movilidad. Actualmente se están explorando alternativas a los combustibles fósiles en favor de los llamados biocombustibles. En el sector del transporte, los carburantes ya incorporan un porcentaje de estos biocombustibles (11%). La pirólisis de materia orgánica (o residuos) permite obtener bio-char, bio-aceite y gas que pueden ser utilizados como biocombustible o como materia prima para el desarrollo de productos químicos y/o adsorbentes.

Objetivo

Revelar la importancia de convertir un residuo de cuero de curtido vegetal mediante pirólisis convencional y pirólisis flash (PC y PF), en biocombustibles y/o biomateriales para su uso en aplicaciones respetuosas con el medio ambiente e intrínsecamente ligado a conceptos de economía circular y sostenibilidad.

Resultados

Se utilizó un residuo de cuero curtido vegetal (BCT) que se adecuó en tamaño para su análisis químico y para los procesos de pirólisis. Del análisis termogravimétrico se seleccionaron las variables de pirólisis. BCT presentó bajo contenido en ceniza (<5%) y alto contenido en materia volátil (≈69%). El análisis elemental reveló elevado contenido en C (≈50%) y N (7,2%). El rendimiento en bio-char (30-33%), bio-aceite (17,5-28,6%) y gas (38,1-52,5%) confirman que altas temperaturas de pirólisis favorecen un mayor rendimiento de gas debido al craqueo secundario de volátiles [1]. Los bio-char presentaron elevado contenido en C (≈78%) y N (≈5%). En los gases de pirólisis predominan el CO₂, CO, CH₄ e H₂, en porcentajes muy diferentes dependiendo del proceso. La PF produjo un gas con mayor contenido en gases combustibles. Los bioaceites mostraron un carácter orgánico aromático y en los aceites flash hubo un claro dominio en hidrocarburos aromáticos policíclicos.

Conclusiones

El residuo de cuero curtido vegetal es apropiado para obtener biocombustibles y/o biomateriales por pirólisis. Los bio-char se pueden utilizar como precursores de carbones activados, para fertilizar suelos o como combustibles. Los gases de PF pueden usarse como biocombustibles. Los bioaceites, de naturaleza orgánica, pueden servir para fabricar productos químicos. Este estudio se presenta como una alternativa a la quema o depósito en vertedero de los residuos de cuero de curtición vegetal, obteniendo productos de alto valor añadido.

Agradecimientos

Los autores agradecen el apoyo económico de la FICYT del Principado de Asturias (AYUD/2021/51379) y del Ministerio de Ciencia e Innovación de España (TED 2021-131713B-I00). Agradecen a Miquel Farrés Rojas S.A. el suministro de los residuos de cuero.

Referencias

[1] Guedes, R.E.; Luna, A.S.; Torres, A.R., "Operating parameters for bio-oil production in biomass pyrolysis: a review", J. Anal. Appl. Pyrol. 129 (2018) 134–149.

Procesos de adsorción para la separación de hidrógeno de diferentes corrientes gaseosas en el contexto de una acería

Gonzalo Tomillo^{*1}, Marcos Cano², Cristina Lausín², Covadonga Pevida¹

¹ Instituto de Ciencia y Tecnología del Carbono INCAR-CSIC, Francisco Pintado Fe 26, 33011 Oviedo, España

² Área of Green energies and CO₂, ArcelorMittal Global R&D, Avilés, España

* gonzalo.tomillo@incar.csic.es

Palabras clave: adsorción, purificación, hidrógeno, PSA

La tecnología PSA (acrónimo del inglés Pressure Swing Adsorption) mayoritariamente empleada en la separación y purificación de gases industriales, se basa en la separación por adsorción física de los componentes de la corriente de gas, quedando adsorbidos, normalmente, los compuestos que se desea eliminar de la corriente para purificarla, como, por ejemplo, CO₂, CH₄, CO etc. [1]. Para poder realizar esta purificación se requieren materiales adsorbentes microporosos con un tamaño de poro definido que permita una separación efectiva de los componentes no deseados. En el caso particular de la purificación de hidrógeno, se ha extendido el uso de adsorbentes como carbones activados, zeolitas y silica alúmina permiten alcanzar niveles de pureza del 99,99% [2]. Esta investigación tiene como objetivo la evaluación de un sistema PSA para la recuperación y purificación de H₂ de corrientes procedentes de acería.

Para llevarlo a cabo, se va a combinar la experimentación en un reactor de lecho fijo a escala de laboratorio con la simulación de procesos.

Hasta la fecha se han caracterizado seis carbones activados comerciales, cuatro zeolitas y dos alúminas de sílice. La determinación de los parámetros texturales se ha realizado midiendo las isotermas de adsorción de N₂ a -196 °C y de CO₂ a 0 °C en sendos equipos volumétricos, ASAP 2010 y TriStar 3000. Asimismo, se ha evaluado la capacidad de adsorción de los materiales a altas presiones de hasta 20 bar de los principales componentes gaseosos presentes en la corriente a purificar (CO₂, CH₄, CO, N₂, H₂). Los parámetros texturales muestran que, como cabría esperar, los adsorbentes seleccionados para la separación de gases de acería son eminentemente microporosos. En concreto, tres de los carbones activados y las dos zeolitas han mostrado características idóneas para la adsorción de CO₂.

Referencias

[1] S. F. K. S. K. Douglas M. Ruthven, Pressure Swing Adsorption. 1938.

[2] A. M. Ribeiro, C. A. Grande, F. V. S. Lopes, J. M. Loureiro, and A. E. Rodrigues, "Four beds pressure swing adsorption for hydrogen purification: Case of humid feed and activated carbon beds," *AIChE Journal*, vol. 55, no. 9, pp. 2292–2302.

Diseño y optimización de un sistema de reformado mejorado de CH₄ con procesos Chemical Looping (SE-CLR)

J. González-Torrijo*, A. Abad, M. de las Obras Loscertales, T. Mendiara, F. García-Labiano

Instituto de carboquímica (ICB), CSIC

*jgonzalez@icb.csic.es

Palabras clave: SE-CLR, reformado, metano, captura CO₂, óxido de níquel, óxido de calcio

Actualmente, uno de los retos más importantes que afronta nuestra sociedad es la producción de energía limpia, de forma que pueda llegar a alcanzar las Emisiones Netas Cero de CO₂. Estas acciones están en concordancia con los objetivos marcados en el Acuerdo de París de 2015. Una de las vías marcadas para lograr esto es la generación de hidrógeno a partir de biocombustibles renovables como el biometano o residuos como puede ser el aceite de cocina. De esta forma, si el combustible utilizado tiene un origen renovable, se lograrían unas emisiones neutras de carbono. Adicionalmente, si se captura el carbono del combustible como CO₂ se lograría producir hidrógeno con emisiones de carbono negativas, es decir, reducir la cantidad de CO₂ en la atmósfera siguiendo el concepto de bioenergía con captura y almacenamiento de CO₂ (BECCS).

En este trabajo se va a evaluar el potencial del proceso de reformado mejorado de bio-metano con captura inherente de CO₂ como una tecnología BECCS. Este proceso es conocido como Sorption Enhanced Chemical Looping Reforming (SE-CLR) y consta de 3 reactores de lecho fluidizado interconectados. En la se puede ver un esquema de este sistema. En el Reactor de Reducción (RR) se lleva a cabo el reformado de CH₄ mediante el aporte de oxígeno en forma de NiO, obteniendo así una corriente gaseosa de H₂ y H₂O. El carbono en el CH₄ lo capta el CaO en forma de CaCO₃, el cual se regenera en el reactor de calcinación (RC), donde se lleva a cabo la separación del CO₂, y regenerando el CaO. Una parte de los sólidos salientes del RC vuelve al RR para mantener el proceso de separación de CO₂ con el CaO, mientras que otra parte se envía al tercer reactor, el Reactor de Oxidación (RO). En el RO el Ni reducido en el RR se oxida con aire a NiO con el propósito de proporcionar el calor necesario en el RC y suministrar el oxígeno consumido durante el reformado de CH₄ en el RR.

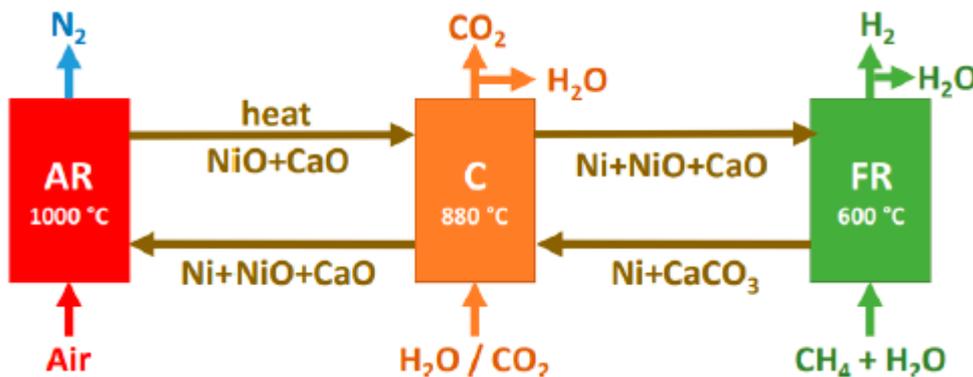


Figura 1. Sistema SE-CLR.

El objetivo de este trabajo es la evaluación de la operatividad del sistema SE-CLR de forma autotérmica. Para ello se realizarán los correspondientes balances de materia y energía al sistema. Se ha considerado la integración energética entre los 3 reactores de lecho fluidizado de los que consta el sistema SE-CLR, a través de los cuales circula un material bifuncional. Este material estará compuesto de un inerte, cuya función será de darle resistencia y durabilidad al conjunto, óxido de níquel, encargado de transportar el oxígeno para que se lleve a cabo el reformado de CH₄ y suministrar la energía necesaria para la autotermicidad del proceso, y óxido de calcio, el cual atraparará el CO₂, para poder liberarlo en el reactor de calcinación. Se ha determinado que las propiedades de este material afectan de forma significativa a las condiciones de operación para mantener energéticamente autónomo el sistema SE-CLR, y por lo tanto, es un factor a evaluar para maximizar la producción de H₂.

Socios protectores del Grupo Español del carbón



Química del Nalón

