

Acid Gases Capture by Ionic Liquids from a Molecular Point of View: A Computational Chemistry Approach

Objetivo del proyecto

El interés del proyecto se centra en cómo los líquidos iónicos (ILs) pueden ser diseñados para realizar separaciones específicas y selectivas de gases, y por lo tanto, una aplicación potencial es la separación de gases de combustión industriales para la eliminación de gases ácidos peligrosos para el medio ambiente. El proyecto estudia la aplicación de ILs para los procesos de captura de gases ácidos, principalmente para CO₂ y SO₂, con base en las propiedades particulares de estos ILs. En comparación con los métodos actuales para la captura y separación de gases ácidos, los ILs tienen varias ventajas tales como menor volatilidad, la menor degradación térmica durante la regeneración y la menor energía requerida para los procesos de desorción en comparación con los métodos estándar. Así mismo, la posibilidad de controlar y diseñar las propiedades de los ILs, a través de una combinación adecuada de iones, permitiría el desarrollo de enfoques abajo-arriba para el diseño de absorbentes adecuados para la captura de gases ácidos.

Se propone un enfoque computacional para diseñar ILs adecuados para la eliminación de gases ácidos. La metodología propuesta en este trabajo para el desarrollo de los procesos de eliminación de gases ácidos utilizando ILs puede resumirse en los siguientes puntos:

- Estudio centrado en ILs compuestos por cationes y aniones con perfiles ambientales y toxicológicos adecuados, que pueden ser obtenidos de fuentes baratas a través de procedimientos de síntesis sencillos, y con propiedades termofísicas adecuadas para fines de diseño de procesos.
- Estudio computacional usando métodos basados en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT), se llevará a cabo para predecir el efecto de catión / anión sobre la solubilidad del CO₂ y SO₂, así como su interacción con los correspondientes iones.
- Estudio computacional, usando dinámica molecular y métodos de Monte Carlo, se llevará a cabo para analizar la interacción entre los líquidos iónicos seleccionados y los gases ácidos estudiados, el mecanismo de absorción a nivel nanoscópico y para inferir información a nivel molecular del comportamiento de los fluidos absorbentes.
- Análisis de los aspectos económicos y tecnológicos de los procesos basados en los ILs seleccionados para estudiar su viabilidad y competitividad con respecto a los métodos de captura actuales para la eliminación de gases ácidos.

El objetivo final del trabajo es encontrar ILs adecuados con baja toxicidad, económicos, que puedan ser producidos a través de procedimientos de síntesis sencillos, con propiedades termofísicas adecuadas, que sean apropiados para la captura de los gases estudiados, y por tanto, que sean competitivos con los procesos de eliminación disponibles. Asimismo, la metodología computacional propuesta permitiría obtener una visión más profunda del mecanismo que controla la absorción de gases ácidos en ILs.



Código CTO2013-40476-R

Periodo de ejecución

1 de enero del 2014 hasta el 1 de enero del 2016.

Financiación del proyecto

Programa Estatal de Investigación, Desarrollo e Innovación Orientado a los Retos de la Sociedad, PLAN ESTATAL DE INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA Y TÉCNICA Y DE INNOVACIÓN 2013-2016 del Ministerio de Economía y Competitividad, MINECO, www.mineco.es

Participantes del proyecto

Grupo Análisis y Simulación Molecular de Fluidos, Departamento de Química. Universidad de Burgos, www.ubu.es/ubu/cm/ubu/temas/DepQuimica

Grupo Thermodynamics for Energy and Environment, Department of Chemical Engineering. Qatar University. Doha. Qatar, www.qu.edu.qa/engineering/chemical

Supercomputación de Castilla y León (SCAYLE), www.scayle.es

Funciones de SCAYLE

Las simulaciones moleculares utilizando métodos DFT y de dinámica molecular para los sistemas considerados, tan solo pueden ser realizadas utilizando grandes recursos computacionales. Todos los cálculos y simulaciones han de realizarse utilizando recursos en paralelo, empleando un gran número de procesadores y con importantes requerimientos de memoria. El proyecto considera el estudio teórico de un número muy elevado de ILs (entre 100 y 200), screening computacional de su capacidad adsorptiva, con lo cual se requerirán un número elevado de horas de cómputo, que sólo pueden realizarse utilizando un supercomputador como CALENDULA. SCAYLE proporcionará los recursos de cálculo intensivo requeridos para llevar a cabo el proyecto.

Agradecimientos a SCAYLE

García, G.; Atilhan, M.; Aparicio, S. RSC Advances 2014,4, 45286-45299.

García, G.; Trenzado, J. L.; Alcalde, R.; Rodríguez, A.; Atilhan, M.; Aparicio, S. Journal of Physical Chemistry B 2014, 118, 11310-11322.

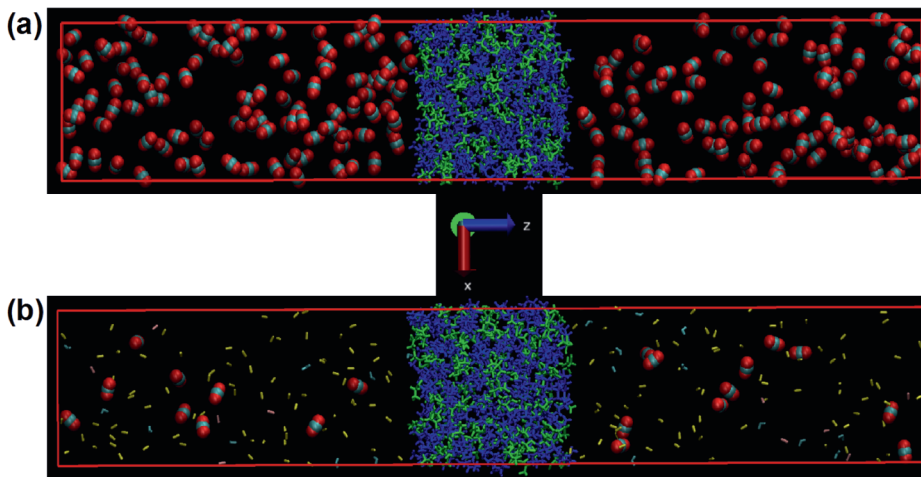
García, G.; Atilhan, M.; Aparicio, S. Journal of Physical Chemistry B 2014, 118, 11310-11322.

Líder del proyecto

GRUPO DE ANÁLISIS Y SIMULACIÓN MOLECULAR DE FLUIDOS, DEPARTAMENTO DE QUÍMICA, UNIVERSIDAD DE BURGOS, ha desarrollado un programa de investigación amplio en el campo de la termodinámica de fluidos y la química computacional en los últimos años, con especial atención a los disolventes alternativos, el gas natural y los líquidos iónicos. Como resultado del desarrollo con éxito de los proyectos concedidos han publicado 60 artículos en los últimos seis años, en revistas con alto nivel de impacto. Asimismo han presentado 25 comunicaciones en conferencias internacionales. Su investigación se desarrolla en colaboración con grupos en diversos países (Qatar, USA, Corea del Sur y Reino Unido).

En los últimos años, el apoyo financiero obtenido ha permitido el establecimiento de un Laboratorio de Investigación en termodinámica y química computacional de fluidos de interés industrial. Han realizado y publicado estudios termofísicos en amplios intervalos de presión y temperatura utilizando técnicas de la más alta precisión. Además, han adquirido y desarrollado herramientas para llevar a cabo estudios de simulación molecular utilizando métodos Ab initio, dinámica molecular y Monte Carlo. Este enfoque combinado experimental / computacional permite obtener un profundo conocimiento de las características moleculares que determinan el comportamiento y las propiedades macroscópicas de los fluidos estudiados, lo que conduce a valiosas relaciones estructura-propiedad.

La investigación actual se centra en tres líneas principales: 1) captura de CO₂ con nuevos materiales, 2) disolventes verdes, incluyendo líquidos iónicos y 3) estudios de las propiedades del gas natural. En este momento se están llevando a cabo estudios para diseñar líquidos iónicos para la captura de CO₂ y el tratamiento del gas natural.



Simulación mediante dinámica molecular de la absorción de: (a) CO₂ puro y (b) gas de combustión (N₂+ CO₂ + O₂ + agua) en el líquido iónico lactato de metilpiperazina.

Justificación del proyecto

Entre los objetivos prioritarios de la Unión Europea está la reducción de las emisiones de gases de efecto invernadero en un 80 % para el año 2050. No obstante, los combustibles fósiles seguirán siendo utilizados en la generación de energía de Europa, así como en otros procesos industriales en las próximas décadas. Por lo tanto, el objetivo de 2050 sólo se puede lograr mediante una reducción de las emisiones procedentes del empleo de combustibles fósiles en el sector de generación de energía y de las industrias con un elevado consumo de energía intensiva. Esto requerirá la aplicación de procesos de captura y almacenamiento de carbono (CAC). Las evaluaciones realizadas en el contexto de la Hoja de Ruta de la UE para la transición a una economía competitiva baja en carbono para 2050 y en la Hoja de Ruta de la Energía para 2050, indican que las tecnologías CAC desarrollarán un papel relevante en las próximas décadas, de tal forma que entre el 7 % y el 32 % de toda la generación de energía utilizará tecnologías CAC en 2050. Asimismo, la utilización de tecnologías CAC en sectores de alto consumo energético (acero, cemento, industria química, refino) contabilizará el 50 % de la reducción total de gases de efecto invernadero para 2050. De esta forma, la UE dentro del programa Horizonte 2020 muestra como un reto fundamental el desarrollo de tecnologías CAC eficientes para los sectores de producción de energía e industrias con alto consumo energético.

Este proyecto se enmarca dentro de uno de los objetivos fundamentales del programa Horizonte 2020 de la UE, por una parte como una contribución significativa dentro del campo de la energía y por otra dentro del campo de la química.

El desarrollo de nuevos métodos de CAC basados en líquidos iónicos supone un avance importante entre las tecnologías de captura desde un punto de vista tecnológico y económico, cuya viabilidad será analizada en el proyecto. Asimismo, la metodología propuesta para el desarrollo y validación de los nuevos absorbentes implica una notable contribución a la química de los líquidos iónicos, de gran atractivo en los últimos años, tanto a nivel de ciencia básica como para su aplicación industrial, en el desarrollo de nuevos materiales (otra de las prioridades del programa Horizonte 2020, al que este proyecto contribuiría mediante la investigación planteada).

El proyecto tiene un gran interés social debido a la mejora de los procesos de producción de energía y la minimización de sus efectos sobre el medio ambiente, a los que da lugar en su ejecución. Aunque se trata de una investigación eminentemente básica, tiene objetivos que son claramente aplicados y en el que muestran el valor de la I+D en la mejora de calidad de vida de las personas, dando lugar a su vez a resultados con un claro valor económico, considerando los costes de las emisiones de CO₂ y su impacto en los procesos productivos.