

# Captura de CO<sub>2</sub> en post-combustión utilizando líquidos iónicos

## Objetivo del proyecto

En el proyecto se plantean varias metas:

- Analizar la capacidad de captura de CO<sub>2</sub> utilizando líquidos iónicos funcionalizados y desarrollados a partir de iones biodegradables.
- Caracterización a nivel nanoscópico de la absorción de CO<sub>2</sub> y otros gases relevantes (SO<sub>2</sub>, NO<sub>x</sub>, N<sub>2</sub> y agua) en los líquidos iónicos seleccionados utilizando métodos de química computacional (DFT y dinámica molecular).
- Predicción teórica de las propiedades termofísicas más relevantes para la captura de CO<sub>2</sub>: densidad, viscosidad, estabilidad térmica y capacidad calorífica. Así como la predicción de la solubilidad del CO<sub>2</sub> en los líquidos iónicos diseñados utilizando dinámica molecular y métodos tipo Monte Carlo.
- Caracterización teórica de las propiedades de las interfases líquido iónico - gases de combustión.
- Análisis cinético teórico del proceso de absorción. Y Análisis tecnoeconómico de los procesos de absorción utilizando los fluidos seleccionados, en comparación con los métodos clásicos basados en aminas.

## Periodo de ejecución

1 de enero del **2015** al 31 de diciembre del **2017**.

## Financiación del proyecto

Convocatoria de Apoyo a proyectos de investigación a iniciar en el año 2015, de la Consejería de Educación de la Junta de Castilla y León, [www.educa.jcyl.es](http://www.educa.jcyl.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](http://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](http://www.qu.edu.qa/engineering/chemical)

Supercomputación de Castilla y León (SCAYLE), [www.scayle.es](http://www.scayle.es)



Junta de  
Castilla y León

Proyecto JCYL, Código BU324U14

## Líder del proyecto

GRUPO DE ANÁLISIS Y SIMULACIÓN DE FLUIDOS de la Universidad de Burgos, [www.ubu.es/ubu/cm/ubu/temas/DepQuimica](http://www.ubu.es/ubu/cm/ubu/temas/DepQuimica), es liderado por el Prof. Santiago Aparicio, Profesor Titular de Universidad del Departamento de Química junto a cuatro investigadores. El Grupo colabora de forma continua con los grupos del Profesor Mert Atilhan (Qatar University, Qatar), C. Yavuz (Korea Advanced Institute of Science, Corea del Sur) y L. Costa (Universidade Federal Fluminense, Brasil), entre otros grupos nacionales e internacionales.

El Grupo posee más de 100 artículos publicados en revistas científicas internacionales en los últimos 5 años. El IP del Grupo ha participado como ponente en multitud de conferencias internacionales.

Tienen proyectos activos financiados por la Junta de Castilla y León, el Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO) y entidades internacionales como Qatar National Research Fund.

## Justificación del proyecto

Existen pruebas experimentales crecientes que muestran que el cambio climático global está ocurriendo. Asimismo, todos los estudios muestran que la causa principal de este cambio es la emisión antropogénica de Gases de Efecto Invernadero (GEI) en la atmósfera. El CO<sub>2</sub> es el GEI más importante (57 %), y de este gas, la fuente más importante son las emisiones relacionadas con la producción de energía (26 %). Los modelos muestran que las emisiones de CO<sub>2</sub> relacionadas con la producción de energía aumentarán desde las 31,2 billones de toneladas (toneladas US) métricas en 2010 a 36,4 en 2020 y a 45.5 en 2040. Este incremento se justifica considerando que el consumo previsto de combustibles fósiles para la generación de electricidad se incrementará a lo largo de los próximos años, a un ritmo del 2,5 % y del 1,8 % anual para el gas natural y el carbón, respectivamente en el intervalo 2010 a 2040. Por tanto, los combustibles fósiles seguirán siendo en las próximas décadas la principal fuente para la generación de electricidad, ya que las fuentes renovables, a pesar de su crecimiento, serán insuficientes para cubrir el incremento de la demanda energética. De esta forma, controlar las emisiones de CO<sub>2</sub> procedentes de la combustión de combustibles fósiles en la producción de energía eléctrica es fundamental para minimizar la contribución al efecto invernadero y al cambio climático, sin frenar el desarrollo económico, tecnológico y social.

Las principales alternativas para el CO<sub>2</sub> procedente de la combustión de combustibles fósiles para la producción de electricidad son: a) Uso en determinados procesos de producción industriales y b) secuestro e inyección en formaciones geológicas tales como yacimientos agotados de petróleo o gas, formaciones salinas, y yacimientos de carbón no explotables. La alternativa del secuestro tendría un mayor impacto en la reducción de las emisiones de CO<sub>2</sub>, considerando el volumen de emisiones. Sin embargo, cualquier alternativa considerada requiere la captura previa de CO<sub>2</sub> de las fuentes en donde se ha formado. Existen tres principales alternativas para la captura de CO<sub>2</sub> en las centrales que funcionan con combustibles fósiles: 1) post-combustión, 2) pre-combustión y 3) oxi-combustión. La captura en post-combustión es aplicable a la mayoría de las plantas ya existentes.

El CO<sub>2</sub> es producido por la combustión de combustibles fósiles en las centrales eléctricas en una mezcla de gases, a presión atmosférica, y con una baja presión parcial del CO<sub>2</sub> (menor de 0,15 atm normalmente), lo cual dificulta el proceso de captura al requerir absorbentes muy eficaces.

Entre los nuevos tipos de materiales propuestos para la captura de CO<sub>2</sub> procedente de plantas de generación de electricidad que utilizan combustibles fósiles, aquellos basados en líquidos iónicos se encuentran entre los más prometedores. Desde un punto de vista químico, los líquidos iónicos son una clase de compuestos que, a pesar de estar formados por cationes y aniones son líquidos a temperaturas próximas a la T<sup>a</sup> ambiente. El notable interés

de los líquidos iónicos, tanto en investigación básica como a nivel industrial, tiene sus raíces en la gran versatilidad de estos nuevos fluidos, considerando la posibilidad de combinar aniones y cationes seleccionados, para obtener las propiedades deseadas para una aplicación específica. El número teórico de posibles líquidos iónicos es muy grande, en torno a 10<sup>6</sup> considerando solamente fluidos puros, este hecho tiene dos consecuencias principales: a) conduce a una nueva química y b) hace necesario el desarrollo de relaciones estructura-propiedad para desarrollar aplicaciones industriales de forma efectiva. En los últimos años, numerosos estudios han propuesto el uso de líquidos iónicos como absorbentes alternativos de CO<sub>2</sub> en post-combustión. El uso de estos absorbentes puede tener varias ventajas, incluyendo que su naturaleza no volátil evita la contaminación de la corriente de gas durante el proceso de captura y no se producen pérdidas de absorbente, reduciendo así el impacto ambiental y los costes económicos. Por otra parte, la regeneración del absorbente es relativamente simple y moderadamente costosa, sin contaminación cruzada.

Para diseñar líquidos iónicos con propiedades mejoradas para la captura de gases ácidos, como el CO<sub>2</sub>, se necesita un gran conocimiento del proceso de solubilidad a nivel molecular, es decir de las interacciones intermoleculares entre las moléculas del gas y los iones correspondientes. Esto nos permitirá obtener información acerca del proceso de captura de CO<sub>2</sub> y su relación con la estructura química, y así poder proponer unas pautas para el diseño racional de líquidos iónicos comenzando por su estructura molecular. El comportamiento de un líquido iónico para su uso en la captura de CO<sub>2</sub> depende de varios factores moleculares, la química computacional ha probado ser una poderosa herramienta para obtener información a nivel nanoscópico del proceso de captura.

Cuando se trata de la aplicación de los métodos computacionales al estudio de la captura de CO<sub>2</sub> usando líquidos iónicos, principalmente podemos distinguir dos tipos de aproximaciones, las cuales pueden ser a su vez combinadas con medidas experimentales para ayudar a la racionalización del comportamiento observado. Como una primera aproximación al análisis de las propiedades de los líquidos iónicos, existen trabajos que aplican la teoría del funcional de la densidad (*Density Functional Theory*, DFT) con el fin de encontrar una relación entre la estructura electrónica en fase gas del líquido iónico y el comportamiento observado. En la mayoría de los estudios teóricos con DFT, estos se emplean para estudiar las interacciones usando proporciones 1:1 entre el par iónico y la molécula de CO<sub>2</sub>, y buscan calcular propiedades energéticas relacionadas con la captura de CO<sub>2</sub>, tales como la energía de interacción (o *binding energy*) y factores entálpicos. Además, las interacciones intermoleculares por enlaces de hidrógeno también pueden ser caracterizadas.

Cuando se trabaja con muestras reales de gases, estas además de CO<sub>2</sub> pueden contener otros gases en menores proporciones, como puede ser H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub> o CH<sub>4</sub>. Sin embargo,

hay pocos trabajos donde la selectividad de familias de líquidos iónicos para la captura de CO<sub>2</sub> frente a otros gases se analice desde un punto de vista molecular.

A pesar de las limitaciones que ofrecen los métodos DFT, sobre todo en relación al reducido número de átomos que se pueden estudiar con respecto a otros métodos de la química computacional, este tipo de trabajos han demostrado ser útiles para la predicción de tendencias en las solubilidades de gases en líquidos iónicos basadas en interacciones a nivel molecular con pequeñas moléculas como puede ser el CO<sub>2</sub>. Así, estudios sistemáticos para familias de líquidos iónicos permitiría obtener información en función de la naturaleza del catión, del anión, o de la longitud de la cadena alquílica.

Para optimizar la captura de gases usando líquidos iónicos, es necesario estudiar como los cambios estructurales afecta a las propiedades físicas, tanto la solubilidad del gas en el líquido, como las propiedades fisicoquímicas del disolvente, tales como la densidad y la viscosidad. En este sentido, las simulaciones de dinámica molecular (*Molecular Dynamics*, MD) son muy útiles para estudiar la relación entre la estructura molecular y propiedades macroscópicas. Además, las simulaciones de Monte-Carlo son ampliamente usadas para predecir la solubilidad de los gases en líquidos iónicos. La determinación experimental de la solubilidad de CO<sub>2</sub> en líquidos iónicos es muy costosa, tanto en tiempo como en recursos, considerando el número de posibles líquidos iónicos y sus posibles funcionalidades. En las simulaciones de dinámica molecular, la fiabilidad de estas va a depender en gran medida de los campos de fuerza seleccionados para describir el comportamiento de las moléculas que forman nuestro sistema. Existen varias aproximaciones para tal fin, podemos encontrar validaciones basadas en el cálculo y comparación con propiedades físicas que se pueden medir experimentalmente. Para estas simulaciones, se usan campos de fuerza parametrizado en nuestro grupo.

En definitiva, el empleo de los métodos de la química computacional permite el calcular y analizar todas aquellas propiedades relacionadas con la captura de CO<sub>2</sub>, acercarnos a la racionalización de dichas propiedades en base a la estructura molecular del líquido iónico. Todo este conocimiento ayuda a proponer un diseño racional de nuevos sistemas de los cuales se espera unas propiedades mejoradas. Además, los estos métodos computacionales se pueden emplear para verificar las mejoras esperadas en estos nuevos líquidos iónicos, antes de proceder a su estudio experimental.

## Funciones de SCAYLE

El elevado número de moléculas estudiado en este proyecto, así como la utilización de métodos de modelización molecular tipo DFT y dinámica molecular para los sistemas considerados, da lugar a la necesidad de grandes recursos computacionales para poder lograr los objetivos propuestos. El uso de los recursos computacionales provistos por SCAYLE a través del supercomputador Caléndula permite la ejecución en paralelo de los códigos de química computacional requeridos para un gran número de procesadores simultáneos. Las simulaciones llevadas a cabo consumen un gran número de horas de computo (varios millones) así como requieren grandes recursos de memoria que son provistos por SCAYLE.

Por otra parte, el personal de SCAYLE se encarga de la instalación y mantenimiento del software requerido para las simulaciones propuestas, lo que permite realizar cálculos en Caléndula de forma continua y eficiente. De esta forma las simulaciones son llevadas a cabo de forma sistemática, lo cual permite el avance del proyecto.

