

# Diseño y caracterización de líquidos porosos para la captura y el almacenamiento de CO<sub>2</sub>

## Objetivo del proyecto

Se basa en el estudio bottom-up de los líquidos porosos para la separación de gases; el estudio químico físico de las propiedades micro y macroscópicas de los sistemas líquidos con porosidad permanente, y en el estudio de la capacidad de dichos sistemas para separación de gas.

## Periodo de ejecución

1 de marzo de 2017 al 28 de febrero de 2021.

## Financiación del proyecto

Convocatoria de propuestas H2020-MSCA-RISE-2016(MSCA-RISE).

## Entidades Participantes del proyecto.

Università di Sassari, [www.uniss.it](http://www.uniss.it)

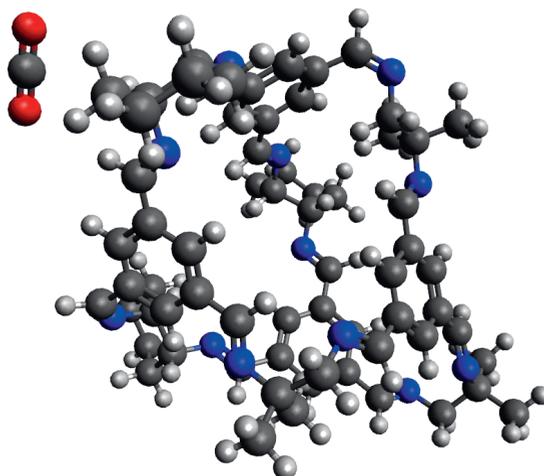
Universidad de Burgos, [www.ubu.es](http://www.ubu.es)

Helmholtz-Zentrum Geesthacht Zentrum für Material und Küstenforschung GmbH, [www.hzg.de](http://www.hzg.de)

Monolithos katalitis kai anakiklosi etaireia periorismenis efthinis Vlachos Nicholas,

Universidad de Chile, [www.uchile.cl](http://www.uchile.cl)

Comisión Nacional de Energía Atómica, [www.cnea.gov.ar/es](http://www.cnea.gov.ar/es)



Interacción entre una molécula porosa con el gas CO<sub>2</sub>.

## Justificación del proyecto

En el proyecto CO2MPRISE se propone buscar nuevos sistemas para la captura y el almacenamiento de CO<sub>2</sub>, desde el diseño y la caracterización de nuevas estructuras moleculares hasta la implementación a una escala más grande y el análisis de sus propiedades macroscópicas. En concreto, el proyecto de investigación se enfoca en la búsqueda de líquidos porosos (sistemas formados para un solvente y una molécula porosa que, por el tamaño del agujero, no deja entrar el solvente, manteniendo así la estructura líquida). Estas estructuras pueden almacenar CO<sub>2</sub> y funcionar, así, como sistemas de separación y almacenamiento de los gases. Dichos sistemas pueden encontrar aplicaciones en varios ramos industriales, debido a su potencial capacidad de separar CO<sub>2</sub> a partir del mismo flujo de gas (durante el proceso) y no, como en el caso de materiales porosos sólidos, cuando el proceso se haya acabado.

## Funciones de SCAYLE

El acceso a las infraestructura de SACYLE dota de los recursos computacionales necesarios para poder realizar los cálculos DFT y MD.

## Líder del proyecto

UNIVERSIDAD DE BURGOS, [www.ubu.es](http://www.ubu.es).

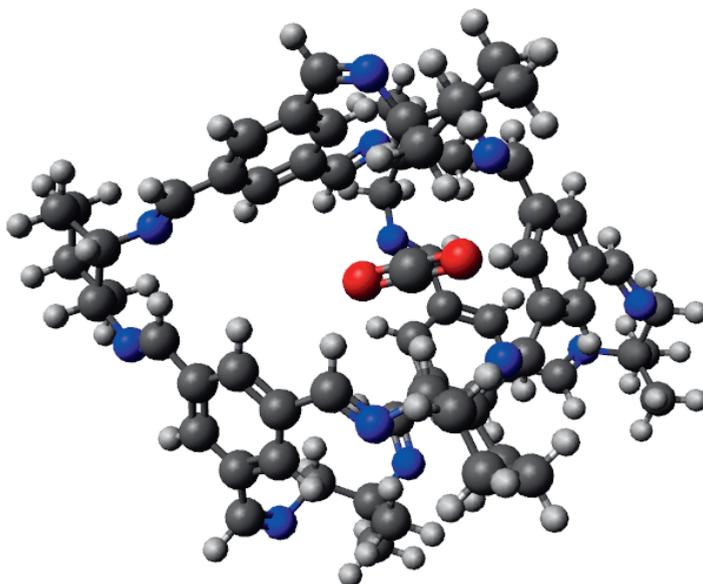
El grupo de investigación está formado por los profesores Santiago Aparicio (IP) y Rafael Alcalde, junto con los estudiantes de doctorado Claudia Pecoraro, Loukia Maritsa, Alberto Gutiérrez, Cesar Herrera y la investigadora postdoctoral María A. Monge.

El grupo lidera la parte computacional del proyecto CO2MPRISE y se ocupa de buscar estructuras para la captura y el almacenamiento de CO<sub>2</sub> y estudiar sus propiedades termodinámicas, a través de cálculos mecanocuánticos, y de analizar sus propiedades dinámicas a través de simulaciones MD, MC, KMC.

El objetivo que se persigue en el grupo de investigación es el de encontrar estructuras con una alta capacidad de almacenamiento de CO<sub>2</sub>.



RISE-2016-CO2MPRISE-734873



Interacción entre una molécula porosa con el gas CO<sub>2</sub>. Uno de los objetivos del estudio es el comprobar si las moléculas porosas pueden acoger el CO<sub>2</sub> y almacenarlo.