

# Nanocomposites porosos de líquidos iónicos para el almacenamiento de metano

## Objetivo del proyecto

Se basa en el estudio combinado teórico-experimental de nuevo tipo de materiales (nanocompuestos) basados en polímeros porosos y líquidos iónicos como adsorbentes adecuados para el almacenamiento de CH<sub>4</sub>. En el proyecto se considera un conjunto de estructuras iniciales que se someten a un modelado a nivel molecular (estudios DFT y MD) utilizando un enfoque 'in silico', utilizando recursos computacionales, y posteriormente, las combinaciones más adecuadas se sintetizan y caracterizan en el laboratorio junto con un amplio estudio de presión-temperatura sobre la adsorción de CH<sub>4</sub>.

## Periodo de ejecución

Enero del año **2019** a diciembre del **2021**.

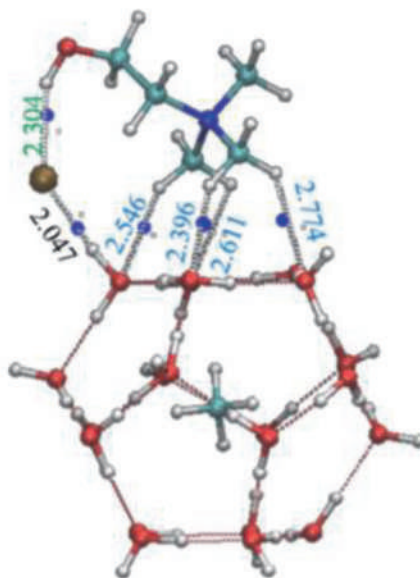
## Participantes del proyecto

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

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

## Financiación del proyecto

Convocatoria de ayudas correspondientes a la convocatoria 2018 de Proyectos de I+D+I «Retos Investigación», del Programa Estatal de I+D+I Orientada a los Retos de la Sociedad, en el marco del Plan Estatal de Investigación Científica y Técnica y de Innovación 2017-2020



Interacción entre una molécula de líquido iónico (en concreto, cloruro de colina, ChCl) con una jaula de moléculas de agua utilizando metano (CH<sub>4</sub>) como molécula huésped. Uno de los objetivos del proyecto es estudiar cómo es el mecanismo de inhibición por parte de los líquidos iónicos a nivel nanoscópico.

## Justificación del proyecto

El aumento de la demanda de energía está provocando que cada vez sean más necesarias fuentes de energía limpias y abundantes para diversas aplicaciones. La producción de gas natural se ha expandido recientemente debido a los avances en la perforación y en las tecnologías (como por ejemplo, la fracturación hidráulica o fracking) y ha permitido un procesamiento de energía más rentable. Sin embargo, la creciente demanda de energía 'limpia' para aplicaciones industriales y de transporte requiere el desarrollo de tecnologías, tanto para el almacenamiento seguro y efectivo, como para el transporte de la custodia a bajas presiones y a temperatura ambiente. En este sentido, el gas natural comprimido es adecuado para aplicaciones de gran tamaño para buques y camiones, mientras que el gas natural adsorbido es más adecuado para aplicaciones móviles pequeñas o medianas, en términos de seguridad y coste económico.

Unos candidatos prometedores para el almacenamiento de gas natural (o metano) son los adsorbentes porosos debido a sus altas porosidades; presentan unas estructuras que permiten varios tamaños de poro y sitios funcionalmente inmovilizados para optimizar sus capacidades de almacenamiento. La integración y la implementación de sistemas alimentados con metano dependen fundamentalmente de que los adsorbentes sean tanto física como químicamente estables y de que tengan unas altas capacidades de almacenamiento.

En este proyecto se considera un nuevo tipo de materiales (nanocompuestos) basados en polímeros porosos y líquidos iónicos, que se diseñan considerando tanto un enfoque experimental como un enfoque computacional para tratar de llegar a las mejores combinaciones moleculares posibles.

## Funciones de SCAYLE

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

### Líder del proyecto

**UNIVERSIDAD DE BURGOS.** El grupo de investigación está formado por los profesores Santiago Aparicio (IP) y Rafael Alcalde, junto con los estudiantes de doctorado Alberto Gutiérrez, Sara Rozas y Nuria Aguilar. El grupo lidera la parte computacional del proyecto y se ocupa de buscar estructuras para la captura y el almacenamiento de CH<sub>4</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 CH<sub>4</sub>.



Código RTI2018-101987-B-I00