SUPERCOMPUTACIÓN
CASTILLA Y LEÓN

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 CH4. 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_4.

Periodo de ejecución

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

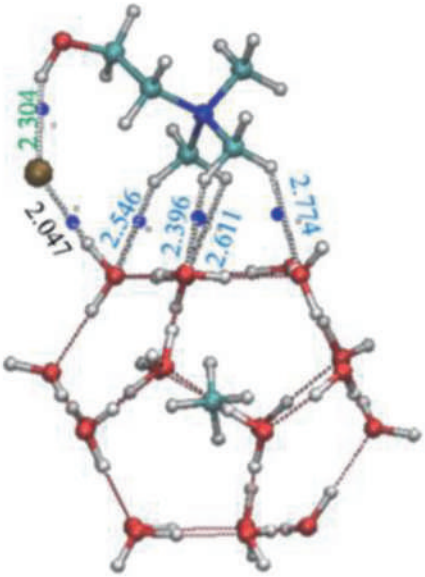
Participantes del proyecto

Universidad de Burgos, *www.ubu.es*

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, Spain, *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 (CH4) 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 CH4 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 CH4.

MINISTERIO DE CIENCIA, INNOVACIÓN Y UNIVERSIDADES

Código RTI2018-101987-B-I00