

# NEFERTITI, Innovative photocatalysts integrated in flow photoreactor systems for direct CO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>O conversion into solar fuels

## Objetivo del proyecto

*El objetivo es desarrollar un sistema fotocatalítico innovador y altamente eficiente que permita la conversión simultánea de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>O en combustibles solares (principalmente etanol y alcoholes C<sub>2</sub><sup>+</sup>), utilizando energía solar. Para ello, el proyecto integra nuevos fotocatalizadores heterogéneos avanzados con reactores fotocatalíticos en flujo continuo, inspirados en procesos de fotosíntesis artificial.*

## Participantes del proyecto

LEITAT Technological Center, <https://leitat.org/es>

National University of Ireland Galway,  
[www.universityofgalway.ie](http://www.universityofgalway.ie)

Peking University, <https://english.pku.edu.cn>

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

Chemtrix BV, <https://chemtrix.com>

SOCAR Turkey R&D and Innovation A.Ş.,  
[www.socar.com.tr](http://www.socar.com.tr)

Institut Català d'Investigació Química, ICIQ, <https://iciq.org>

Fundación para el Desarrollo y la Innovación  
Tecnológica FUNDITEC, <https://funditec.es>

University of Michigan, <https://espanol.umich.edu>

Stratagem Energy Ltd, <https://stratagem.com>.

## Financiación del proyecto

Proyecto financiado por el programa Research and Innovation Horizon 2020 de la Unión Europea (Número de proyecto: 101022202), dentro de la convocatoria H2020-LC-SC3-2018-2019-2020 y el tópico LC-SC3-RES-3-2020.

## Funciones de SCAYLE

El proyecto NEFERTITI requiere capacidades avanzadas de computación de altas prestaciones (HPC) para realizar las siguientes tareas:

- Simulación atómica y modelado teórico de procesos fotocatalíticos.
- Estudio de mecanismos de reacción, transferencia de carga y formación de enlaces C-C.
- Análisis computacional de materiales avanzados y superficies catalíticas.
- Apoyo al diseño y optimización de fotocatalizadores y reactores.

**Ejecución:** 2021 al 2025.



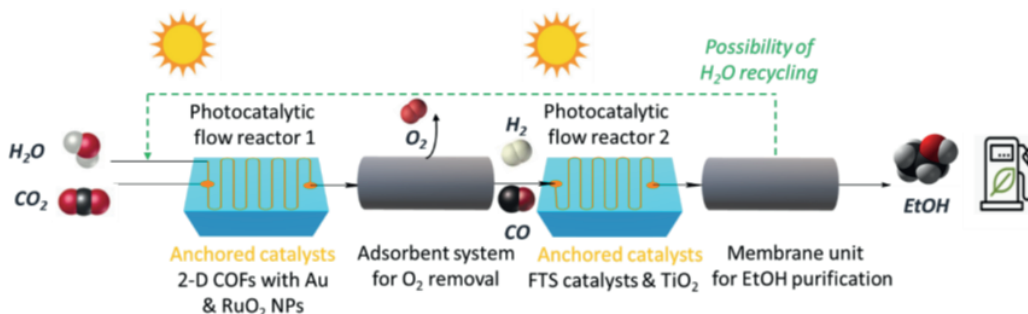
Grant Agreement No. 101022202

## Justificación del proyecto

NEFERTITI surge como respuesta a la necesidad urgente de reducir las emisiones de gases de efecto invernadero y avanzar hacia un sistema energético sostenible. El proyecto aborda uno de los grandes retos tecnológicos actuales: la conversión directa de  $\text{CO}_2$  en combustibles líquidos de valor añadido mediante procesos fotocatalíticos eficientes, continuos y escalables. Su enfoque innovador contribuye al desarrollo de tecnologías de fotosíntesis artificial con alto potencial industrial y medioambiental.

## Líder del proyecto

LEITAT Technological Center es un centro tecnológico privado sin ánimo de lucro con sede en Tarragona (España), dedicado a la investigación, el desarrollo y la innovación (I+D+i). Con más de 100 años de experiencia, LEITAT trabaja en colaboración con empresas y organizaciones para transformar el conocimiento científico en valor económico, social y sostenible. Su enfoque abarca múltiples sectores, incluyendo materiales avanzados, biotecnología, sostenibilidad, energía, salud y manufactura avanzada. LEITAT destaca por su capacidad para impulsar tecnologías innovadoras y soluciones prácticas que fomentan la competitividad y la sostenibilidad industrial.



Dispositivo integrado con reactor de doble flujo NEFERTITI.