

Nanomateriales y Química Fina para mejorar el entorno

EL conocimiento preciso de los sitios activos superficiales y de las especies intermedias de las diversas reacciones permiten controlar la producción selectiva de compuestos químicos de interés

La Química Fina es la síntesis de productos químicos específicos. El Grupo de Diseño y Aplicación de Catalizadores Heterogéneos CSIC-UNED enfoca sus estudios en este campo y también en reacciones de producción y almacenamiento de hidrógeno, en síntesis de nanomateriales, o en procesos de eliminación de compuestos contaminantes tóxicos, tanto de gases como disueltos en agua. El interés por investigar las reacciones superficiales de los catalizadores resulta imprescindible a la hora de mejorar y de crear dispositivos con aplicaciones importantes en la eliminación de contaminantes y en el diseño de procesos más ecológicos.

Sabrina Bagarella

El grupo de Diseño y Aplicación de Catalizadores Heterogéneos es una unidad asociada entre la Universidad Nacional de Educación a Distancia (UNED) y el Instituto de Catálisis y Petroleoquímica del CSIC. Antonio Guerrero Ruiz e Inmaculada Rodríguez Ramos dirigen proyectos relacionados con la Química de Superficies, un área pluridisciplinar de investigación en reacciones químicas que ocurren en la interfase entre los reactivos, en fase gaseosa o en disolución, y un sólido catalítico.

Los investigadores afirman que solamente mediante un conocimiento preciso de los sitios activos superficiales y de las especies intermedias de las diversas reacciones se puede llegar a controlar la producción selectiva de compuestos químicos de interés. Estos estudios los enfocan en procesos del campo de la Química Fina, en reacciones de producción y almacenamiento de hidrógeno, en síntesis de nanomateriales, o en procesos de eliminación de compuestos contaminantes tóxicos, tanto de gases como disueltos en agua.

“Nuestros catalizadores son realmente nanomateriales. Normalmente son cristallitos metálicos que contienen entre 10 y 1000 átomos, la mayoría expuestos en sus superficies”, explica Guerrero, quien considera que la aproximación del grupo a los procesos catalíticos es un elemento diferenciador. “A los ingenieros les interesan los resultados de los procesos, pero nosotros queremos estudiar a nivel químico molecular las superficies y las reacciones superficiales de los catalizadores en sí mismas”.

“Hay muchas posibilidades de estudio en la Química de Superficies, permitiendo la mejora o bien la creación de nuevos catalizadores”, explican los investigadores. “Este estudio aporta información detallada, necesaria en el diseño molecular de nuevos sistemas”.

Líneas de Investigación

La actividad del Grupo de Diseño y Aplicación de Catalizadores Heterogéneos puede



Antonio Guerrero e Inmaculada Rodríguez en un laboratorio del ICP

La Química de Superficies pretende un conocimiento preciso de los sitios activos superficiales

sintetizarse en las siguientes líneas de investigación, las cuales tienen aplicaciones medioambientales y tecnológicas:

Química de C1, producción y almacenamiento de Hidrogeno

- Hidrogenación de óxidos de carbono
- Nanotubos de Carbono
- Aplicación de reactores membrana
- Celdas de combustible de alimentación directa de metanol
- Transformaciones y combustión del gas natural
- Procesos que incluyen la utilización del CO₂

Hidrogenaciones selectivas

- Hidrogenaciones funcionales selectivas y enantioselectivas
- Diseño de nanopartículas mono y bimetalicas soportadas

Adsorbentes y catalizadores para el tratamiento de efluentes que contienen contaminantes

- Tratamiento de aguas contaminadas mediante adsorbentes
- Catalizadores para la eliminación de contaminantes

Óxidos y nitruros metálicos

- Caracterización y mecanismos de reacción en óxidos metálicos
- Aplicaciones como catalizadores de nitruros metálicos

Química Fina y medioambiente

Rodríguez y Guerrero destacan la utilidad de sus estudios, particularmente dentro de la Química Fina, en la prevención de problemas medioambientales. "Antes se trataba de combatir o reducir los contaminantes presentes en el ambiente. Nosotros nos especializamos en prevenir que esa contaminación se produzca", explican. Esta tendencia a la prevención se podría catalogar como Química Ecológica. "Este es un punto de inflexión en el campo de la química, pues supone el re-diseño total de los procesos para no contaminar en ninguna de sus etapas. Esto es también lo que pretende la Química Fina a través de la economía atómica, la cual evita el desperdicio de materiales", señala Guerrero. La síntesis de productos químicos específicos (Química Fina) se realiza aplicando catalizadores de alta selectividad, como en el caso de las reacciones de hidrogenación.

Los problemas medio-ambientales, principalmente de eliminación catalítica de gases contaminantes atmosféricos (NO_x, CO₂, SO₂,..) se abordan mediante el diseño y desarrollo de catalizadores sólidos eficaces. La producción de compuestos químicos básicos, por ejemplo hidrocarburos o gas de síntesis, se intenta realizar aplicando los conceptos de la Química del C1.

"De aplicación tecnológica inmediata se pueden catalogar nuestros proyectos de combustión total y de transformación de hidrocarburos", explica Inmaculada Rodríguez. En estos estudios se utilizan una gran variedad de técnicas y metodologías experimentales entre las que se pueden señalar: técnicas espectroscópicas (Mössbauer, FTIR, XPS, XANES), técnicas de análisis térmico (microcalorimetría, TG, TPR, TPD), técnicas analíticas (cromatografía de gases, espectrometría de masas),

La Química Fina evita el desperdicio de materiales a través de la economía atómica

microscopía electrónica o difracción de rayos X.

Metodologías experimentales propias y novedosas

Entre las metodologías novedosas desarrolladas por el grupo, Rodríguez y Guerrero destacan las siguientes:

- El uso de moléculas marcadas isotópicamente para seguir los mecanismos de las reacciones superficiales
- Microcalorimetría de quimisorción: para evaluar la cantidad de centros superficiales y la energía (calor) con la que interaccionan diversas moléculas sonda sobre las superficies de los catalizadores sólidos
- Estudios cinéticos y de mecanismos de las reacciones químicas por análisis a tiempos del orden del milisegundo. Esto se realiza en un reactor de Temporal Analysis of Products, TAP

En el grupo se integran investigadores pertenecientes a CSIC, UAM y UNED, manteniendo colaboraciones con Departamentos de las Universidades de Zaragoza y Granada y el Instituto de Carboquímica del CSIC en Zaragoza. En cuanto a colaboraciones internacionales, el grupo tiene relaciones con los Departamentos de Química de la Universidad de Aberdeen en Escocia (Reino Unido), el *Boreskov Institute of Catalysis* en Novosibirsk (Rusia), el *Laboratoire de Catalyse en Chimie Organique* del CNRS y la Universidad de Poitiers en Francia, el *Institut de Recherches sur la Catalyse* en Lyon (Francia) y finalmente el *State Key Laboratory of Catalysis* ubicado en Dalian, China.

Ciencias experimentales a distancia

“La UNED tiene la misma función que cualquier otra universidad: Formar profesionales y generar investigación”, afirma Antonio Guerrero, quien además de investigador principal de la Unidad Asociada al Instituto de Catálisis y Petroleoquímica es Profesor Titular en el Dpto. de Química Inorgánica y Técnica de la UNED en Madrid.

“Se trata de descentralizar la enseñanza, de manera tal que en cualquier sitio de España el alumno puede formarse y acceder a un tutor”. Guerrero equipara este sistema con el anglosajón, en el cual el alumno es quien tiene que resolver los problemas, y aparte tiene tutorías. “En el caso de las ciencias experimentales, las prácticas en laboratorio son imprescindibles, pero en este sistema se realizan de manera intensiva”, explica el profesor, quien considera que se trata de un sistema dinámico con muchas perspectivas de futuro.

“La educación magistral va a cambiar en los próximos años. Los Acuerdos de Bolonia, por ejemplo, asumen al profesor como un tutor. Es muy posible que la educación como la conocemos tienda cada vez más a parecerse al modelo de la UNED”.

FICHA TÉCNICA

Centro: Instituto de Catálisis y Petroleoquímica (CSIC)

Investigador: Antonio Guerrero e Inmaculada Rodríguez

Dirección: C/ Marie Curie, 2

Teléfono: 91 585 47 65

Fax: 91 585 47 60

Email: aguerrero@ccia.uned.es, irodriguez@icp.csic.es

Página web: <http://www.icp.csic.es/gdmch/>

Líneas de investigación:

- Química de C1, síntesis de CNT, producción y almacenamiento de Hidrógeno
- Química Fina: Hidrogenaciones selectivas
- Adsorbentes y catalizadores para el tratamiento de efluyentes que contienen contaminantes
- Óxidos y nitruros metálicos