

PLA DE RECERCA

Nom: JUDIT LLOREDA RODES

Data: 23/05/2023

Directors: Dra. Elvira Gómez i Dr. Albert Serrà

Tutora: Dra. Elvira Gómez

Línia de recerca: Preparació i caracterització de nous materials (codi 101343)

Títol de la Tesi: Obtenció termo-catalítica d'hidrogen verd a partir de biogàs. Disseny i preparació de catalitzadors eficients.

El projecte ha de constar de les següents parts:

1. Introducció: interès del projecte
2. Objectius
3. Pla de treball i cronograma.
4. Bibliografia

Màxim 1300 paraules (sense comptar la bibliografia)

**Este proyecto forma parte del Plan de Doctorados Industriales impulsado por la Secretaria d'Universitats i Recerca de la Generalitat de Catalunya (proyecto 2022 DI 035), en colaboración entre el Consorci per a la Gestió de Residus del Vallès Oriental (CRGVO) y la Universitat de Barcelona (UB), con el objetivo de desarrollar líneas de investigación relacionadas con la gestión y aprovechamiento de residuos en el CGRVO, dentro del proceso de ampliación de la planta de digestión anaeróbica y de compostaje.*

Introducción

Los efectos del cambio climático y del calentamiento global se deben, en gran medida, al uso de los combustibles fósiles^[1]. Con el objetivo de reducir dichas emisiones y de garantizar el acceso a una energía asequible, segura, sostenible y moderna (ODS 7)^[2], las nuevas políticas se dirigen hacia una descarbonización de la energía. En este contexto los gases renovables, tales como el biogás, el biometano y el hidrógeno, destacan como nuevas fuentes de energía verde tanto a nivel doméstico como industrial.

En el CGRVO (<https://cresidusvo.cat>) se produce biogás ($\text{CH}_4 + \text{CO}_2$) a partir de residuos orgánicos urbanos, y actualmente está en construcción una instalación de *upgrading* para obtener biometano, siendo el objetivo el avance hacia vías de valorización del biogás convirtiéndolo en hidrógeno verde. Conversión que sigue a la espera del desarrollo de nuevas tecnologías que permitan resolver los altos requerimientos energéticos del proceso y la eficiencia de producción de H_2 , que hagan económicamente viable su implantación a nivel industrial^[3].

En este escenario, destacan los materiales bimetálicos y multi-metálicos para el desarrollo de catalizadores heterogéneos. En especial aquellos basados en níquel, dado sus propiedades auto catalíticas hacia el hidrógeno, y su bajo coste comparado con los metales nobles^[4]. Se propone preparar aleaciones con otros metales para potenciar las propiedades catalíticas del material y la selectividad hacia la producción de hidrógeno. La posibilidad, además, de depositar electroquímicamente dichos metales favorece el posterior escalado a nivel industrial del proceso de síntesis del catalizador^[5].

El uso de un catalizador disminuye la energía de activación de la reacción, pero seguirá siendo imprescindible un aporte externo de energía. En este contexto, se pretende innovar incorporando la *magnetotérmia* como técnica de aporte energético^[6]. Dicha técnica permite calentar un material ferromagnético mediante inducción magnética utilizando bajas potencias, lo cual supone una considerable reducción del consumo energético.

Objetivos

El objetivo de esta tesis es desarrollar catalizadores base níquel para la obtención de hidrógeno verde a partir del biogás que se produce en el CGRVO, procedente de residuos orgánicos urbanos. Los objetivos específicos reflejan la interdisciplinariedad de este proyecto, y son los siguientes:

1. Estudio y preparación electroquímica de aleaciones base níquel.
2. Preparación y caracterización de catalizadores.
3. Estudio y optimización de las condiciones de reacción a partir de biogás sintético en horno convencional.
4. Evaluación de la *magnetotérmia* como método de suministro de energía y optimización de los parámetros magnéticos.

Plan de trabajo y cronograma

El plan de trabajo se ha dividido en las siguientes tareas:

Objetivo 1: Estudio y caracterización electroquímica de aleaciones base níquel

- Tarea 1.1. Búsqueda bibliográfica

Búsqueda bibliográfica para conocer el estado del arte del desarrollo y diseño de catalizadores base níquel para la conversión de biogás en hidrógeno. Análisis de las diferentes reacciones que permiten obtener hidrógeno a partir de biogás.

- T1.2. Selección de aleaciones de base níquel

En base a la búsqueda bibliográfica, selección de los aleantes candidatos a formar potenciales catalizadores de la reacción de conversión de biogás en hidrógeno. En una primera aproximación se han escogido cobalto, hierro y zinc.

- T1.3. Diseño y estudio del baño electroquímico sobre soporte inerte

Para cada aleación se diseñará el baño electroquímico. Se estudiará la influencia sobre el proceso de los diferentes parámetros electroquímicos y se optimizará el proceso de deposición sobre un soporte inerte de carbono vítreo.

- T1.4. Caracterización

Caracterización morfológica, composicional y estructural de los depósitos preparados sobre carbono vítreo mediante FE-SEM, EDS, XRD, XPS.

Objetivo 2: Preparación de aleaciones base níquel

- T2.1. Estudio y condiciones de electrodeposición sobre el sustrato

Dada la aplicación final, el sustrato debe ser ferromagnético, resistente a altas temperaturas y permitir la circulación del gas. Se escoge un soporte de acero inoxidable sinterizado que cumple los requisitos, y para el cual se seleccionarán las condiciones de electrodeposición y se optimizarán los parámetros de preparación asegurando la reproducibilidad.

- T2.2. Preparación de catalizadores

Preparación de depósitos en diferentes condiciones que serán testados en la Tarea 3.

- T2.3. Comportamiento magnetotérmico de los materiales preparados

Análisis del comportamiento magnetotérmico de los catalizadores para determinar la influencia de la composición y del espesor del recubrimiento sobre la respuesta magnetotérmica.

Objetivo 3: Reacción de obtención de hidrógeno en horno convencional. Todas las etapas de esta tarea se llevarán a cabo usando biogás sintético y un horno convencional como fuente de aporte de energía.

- T3.1. Optimización de las condiciones de reacción

Evaluación de las propiedades catalíticas de los diferentes materiales preparados, usando un reactor metálico, lo que exigirá una búsqueda de diferentes componentes comerciales que conformen un reactor ajustado a la geometría del catalizador. Se evaluará la influencia de parámetros como temperatura, tiempo de retención, ratio $\text{CH}_4:\text{CO}_2$ y área para cada tipo de catalizador. El *feed-back* de los resultados sobre la conversión de los gases reactantes y de la selectividad de la reacción para minimizar reacciones secundarias promoverá la conveniente modificación del catalizador.

Objetivo 4: Reacción de obtención de hidrógeno mediante inducción magnética.

- T4.1. Adaptaciones para uso de la *magnetotérmia*

Modificación del sistema para emplear la *magnetotérmia* como técnica de aporte energético. Para ello se adaptará un reactor de cuarzo para poder realizar la reacción, al permitir el uso de campos magnéticos sin interferir, al no tratarse de un material ferromagnético. Optimización de los parámetros magnéticos del equipo de inducción para alcanzar la temperatura de reacción.

- T4.2. Reacción de obtención de hidrógeno con biogás sintético

Con las adaptaciones realizadas, reacción de obtención de hidrógeno con las condiciones optimizadas en el Objetivo 3, en el reactor de cuarzo, y mediante el uso de la *magnetotérmia* como técnica de aporte de energía.

- T4.3. Reacción de obtención de hidrógeno con biogás real

Test de obtención de hidrógeno a partir de biogás producido en el CGRVO, usando las condiciones de reacción optimizadas, el reactor de cuarzo y la inducción magnética. Estudio de los posibles efectos no deseados (disminución de la eficiencia del catalizador, reacciones secundarias, ...) debidos a la presencia de gases minoritarios (H₂S, NH₃, VOCs...).

Objetivo 5: Diseminación, redacción y defensa de la tesis doctoral.

- T5.1. Diseminación de los resultados

Diseminación de los resultados obtenidos mediante publicaciones y participaciones en congresos.

- T5.2. Redacción y defensa

Recopilación, estructuración, redacción y revisión de la memoria de la tesis doctoral. Preparación y defensa de la tesis doctoral.

A continuación, se presenta el cronograma de trabajo mostrando la evolución y distribución de las diferentes tareas definidas con anterioridad a lo largo de tres años:

Tarea	Descripción	Año 1			Año 2			Año 3		
Obj.1	Estudio y caracterización electroquímica de aleaciones base níquel									
T1.1	Búsqueda bibliográfica	x	x	x			x		x	
T1.2	Selección de aleaciones base níquel		x	x	x	x	x	x		
T1.3	Diseño y estudio del baño electroquímico sobre soporte inerte		x	x		x		x		
T1.4	Caracterización		x	x	x		x		x	
Obj.2	Preparación de aleaciones base níquel									
T2.2	Estudio y condiciones de electrodeposición sobre el sustrato		x	x	x		x			
T2.3	Preparación de depósitos			x	x	x	x	x	x	
T2.4	Comportamiento magnetotérmico de los materiales preparados			x	x	x				
Obj.3	Reacción de obtención de hidrógeno en horno convencional									
T3.1	Optimización de las condiciones de reacción				x	x	x	x		
Obj.4	Reacción de obtención de hidrógeno mediante inducción magnética									
T4.1	Adaptaciones para uso de <i>magnetotérmia</i>						x	x		
T4.2	Reacción de obtención de hidrógeno con biogás sintético							x	x	x
T4.3	Reacción de obtención de hidrógeno con biogás real								x	x
Obj.5	Diseminación, redacción y defensa de la tesis doctoral.									
T5.1	Diseminación de los resultados				x		x		x	x
T5.2	Redacción y defensa									x

Referencias

[1] VanLoon, G.W., Duffy, S.J. 2011. Environmental Chemistry: A Global Perspective, 3rd ed. Oxford University Press, New York.

[2] Naciones Unidas, Objetivos de Desarrollo Sostenible (<https://www.un.org/sustainabledevelopment/es/energy/>)
Consulta: 8 de mayo de 2023.

[3] Jung, S., Lee, J., Moon, D.H., Kim, K.H., E. Kwon, E.E. 2021. Upgrading biogas into syngas through dry reforming. Renewable Sustainable Energy Rev. 143, 110949-110960.

[4] Fazlikeshteli, S., Vendrell, X., Llorca, J. 2023. Low-temperature partial oxidation of methane over Pd-Ni bimetallic catalysts supported on CeO₂. Int. J. Hydrogen Energy 48, 12024-12035.

- [5] Hussain, M., Manjunatha, J.G. 2022 Functionalized nanomaterial-based electrochemical sensors: principles, fabrication methods, and applications. 1st ed., Woodhead Publishing, Elsevier, United Kingdom.
- [6] Dotsenko, V.P., Bellusci, M., Masi, A., Pietrogiacomini, D., Varsano, F. 2022. Improving the performances of supported NiCo catalyst for reforming of methane powered by magnetic induction. Catal. Today 418, 114049-114057

Signatura:

Doctoranda