

Identificación del proyecto

Nombre del proyecto

Modelage microcinético y analysis de datos predictivo hacia el diseño de catalizadores moleculares mejorados para la oxidación del agua

Expediente numero

CNS2022-136079



Descripción del proyecto

Los ecosistemas terrestres están en apuros debido a la Emergencia Climática. Los humanos debemos ser inteligentes y establecer cambios significativos en la economía, la sociedad y sustituir los combustibles fósiles. La energía solar y eólica se consideran clave en este cambio, pero para una serie de aplicaciones, la electricidad (mediante el uso de baterías) no es una opción real (ex. transporte pesado). El H₂ se considera un vector energético interesante, la idea es utilizar electricidad verde para producirlo y gastarlo con 0 emisiones de CO₂. Sin embargo, la electrólisis del agua necesita superar grandes sobrepotenciales que resultan en importantes pérdidas de energía, que los catalizadores pueden reducir. La oxidación del agua es la semirreacción con mayor sobrepotencial asociado y, por lo tanto, un buen catalizador para este proceso es de gran interés. Este proyecto pretende abordar aspectos clave de la oxidación del agua para trabajar hacia mejores catalizadores moleculares desde dos frentes: Primero, lograr mejores catalizadores basados en una comprensión completa del sistema catalítico. La química computacional se ha convertido en una herramienta clave en el estudio de los mecanismos de reacción, pero los perfiles de energía no son suficientes para describir las reacciones químicas (debido a las concentraciones) por lo que se necesitan modelos microcinéticos. Para las reacciones químicas, la evaluación de las velocidades de reacción es, en general, sencilla mediante el uso de barreras de energía libre para cada paso y la ecuación de Eyring-Polanyi. Sin embargo, para los pasos electroquímicos, la obtención de constantes de velocidad no es tan sencilla. Existen en la literatura diferentes enfoques que el proyecto pretende evaluar. La identificación de la forma más adecuada para modelar la cinética de pasos electroquímicos bajo diferentes condiciones es uno de los objetivos de esta propuesta. Con la metodología clave identificada, el proyecto pretende comprender completamente la oxidación catalítica del agua para los sistemas seleccionados. La no utilización de modelos microcinéticos dificulta la correcta extracción de conclusiones cuando compiten pasos electroquímicos y químicos. Las lecciones aprendidas del estudio de la oxidación del agua podrían transferirse en el futuro a otras reacciones electrocatalíticas.

En segundo lugar, el proyecto también pretende la mejora de los catalizadores de oxidación del agua mediante el uso del análisis de datos. La mejora de los sistemas catalíticos generalmente se realiza mediante estudios mecanísticos, seguido de un diseño racional. Sin embargo, esto es costoso en horas de cálculo y recursos humanos. El éxito del análisis de datos en todas las áreas de la química (y la ciencia) respalda la dedicación de esfuerzos hacia este fin. Las técnicas de análisis de datos ya se han aplicado a la mejora de catalizadores heterogéneos, pero no mucho, hacia la mejora de catalizadores moleculares. Dentro de esta propuesta, se recopilarán los datos disponibles sobre catalizadores moleculares para construir una base de datos para luego aplicar técnicas de análisis de datos y predecir la actividad catalítica de diferentes candidatos. Existen múltiples factores que afectan el proceso de oxidación del agua y muchos tipos posibles de candidatos a catalizadores, por lo que mejorar las herramientas utilizadas para seleccionarlos debería ayudar a lograr mejores catalizadores y a comprender mejor la reacción.

Financiación

Entidad financiadora

MICIU/AEI /10.13039/501100011033 y por la Unión Europea NextGenerationEU/PRTR

Importe

127.897,00