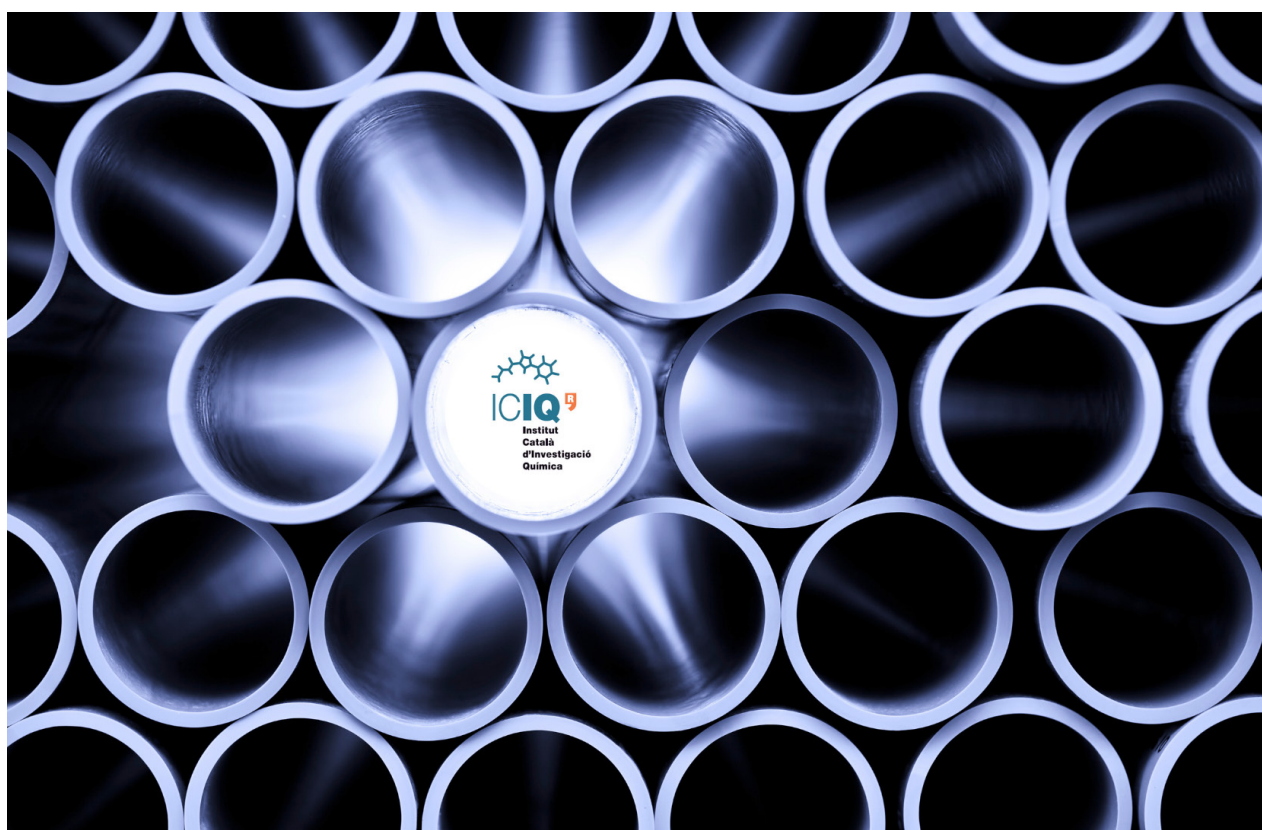


Evitar el mercurio en la producción de PVC



El artículo "Performance descriptors of nanostructured metal catalysts for acetylene hydrochlorination", publicado en Nature Nanotechnology ⁽¹⁾, en el que participa el grupo López del ICIQ, proporciona una nueva estrategia para racionalizar el descubrimiento de catalizadores.

(1) Performance descriptors of nanostructured metal catalysts for acetylene hydrochlorination. Kaiser, S. K.; Fako, E.; Surin, I.; Krumeich, F.; Kondratenko, V. A.; Kondratenko, E. V.; Clark, A. H.; López, N.; Pérez-Ramírez, J. Nat. Nanotechnol. 2022 DOI: 10.1038/s41565-022-01105-4

Desde la década de 1960 los científicos han buscado un catalizador libre de mercurio para la producción del monómero de cloruro de vinilo (VCM), un precursor del polímero de cloruro de polivinilo (PVC). El PVC es un plástico muy demandado, utilizado en innumerables aplicaciones, desde marcos de ventanas hasta bolsas de almacenamiento de sangre. La producción global actual, de 13 millones de kilogramos de PVC anuales, emite 40 toneladas de mercurio al medio ambiente cada año. Por lo tanto, es imperativo encontrar catalizadores sostenibles para la producción de monómeros, como se prometió en la Convención de Minamata sobre Mercurio de 2013 (<http://www.mercuryconvention.org/en>). Pero encontrar catalizadores de reemplazo no es tarea fácil.

DESCUBRIMIENTO GUIADO DE CATALIZADORES

Los catalizadores nanoestructurados y de un solo átomo (SAC) han revolucionado el campo de la catálisis heterogénea en la última década, revelando una reactividad distintiva que los científicos utilizan para resolver grandes desafíos, como la producción de VCM. Ahora, investigadores del grupo López del ICIQ, junto con colaboradores de ETH Zurich, el Leibniz Institute per Catalysis y el Paul Scherrer Institute, han publicado un artículo en *Nature Nanotechnology*, donde, al analizar una biblioteca de nanopartículas y monoátomos, logran descubrir una estrategia para identificar los descriptores de desempeño catalítico. Esta nueva estrategia permitirá a investigadores de todo el mundo identificar los parámetros necesarios para el diseño racional de catalizadores para las reacciones de hidroclicación y otras.

Para identificar los descriptores que ayudarán a encontrar un catalizador alternativo para la reacción de hidroclicación, los investigadores generaron una plataforma de cata-

“Necesitamos mejorar la síntesis para mejorar todo el sistema de producción de PVC”

Nuria López

Directora grupo de investigación Institut Català d'Investigació Química (ICIQ)

Nuria López es licenciada en Químicas y doctora en Química Teórica por la Universidad de Barcelona. Trabajó en el Centro de Física de Materiales a Escala Atómica dirigido por el Jens K. Nørskov (Dinamarca), y desde 2005 en el ICIQ, en donde dirige un grupo de investigación centrado en la teórica en foto-electro-catálisis heterogénea. “Premio a la excelencia” concedido en 2015 por la Real Sociedad Española de Química, colabora con varias industrias europeas para aprovechar el modelado atomístico.

• **Siendo los catalizadores heterogéneos la base de su grupo de investigación, ¿qué significa para el desarrollo de su grupo está investigación y su aplicación para la producción de monómero de cloruro de vinilo (VCM)?**

Mis colaboradores de ETH y mi grupo tienen como foco principal de investigación la producción sostenible en términos energéticos. Y esto implica desde la reducción de compuestos peligrosos, como el caso del VCM, a reducción de la demanda energética o a nuevos feedstocks. Lo que significa que, en nuestro caso, es un paso más en estos objetivos.

• **¿Se inscribe este desarrollo en la corriente mantenida desde hace años por “la catálisis de oro verde”, es decir, la sustitución del mercurio por oro en la producción de PVC? ¿Qué diferencias o sinergias mantiene con estas aplicaciones ya existentes?**

Los sistemas basados en oro tienen estabilidades relativamente cortas. En nuestro caso la estabilidad a tiempos largos es una de los criterios más importantes en el desarrollo de nuevas soluciones.

• **Junto con las ventajas medioambientales, ¿qué otros beneficios pueden aportar estos desarrollos, especialmente para el sector industrial?**

Los materiales basados en *single-atom* dispersos en carbonos representan un avance en la utilización de los elementos más caros y escasos de la tabla periódica. Si conseguimos hacerlos suficientemente densos -muchos grupos están trabajando en esto-, conseguiremos una mejor utilización de los recursos y un grado de reuso y reciclaje más elevado. Estos materiales están llamados a hacer una revolución silenciosa en muchos productos, particularmente en farma, donde la cantidad de metal que se pierde en cada ciclo y que puede incorporarse al producto final es un problema acuciante.

• **Siendo la región Asia-Pacífico la principal productora y consumidora de PVC, ¿trabajan Vds. en coordinación con centros de investigación de estos países, de cara a una presentación directa con la industria?**

Trabajamos con diferentes empresas en diferentes áreas. Siendo un grupo teórico, esto es particularmente diferencial e importante, particularmente a nivel español. Respecto al área del Pacífico, sí trabajamos con diversos grupos, pero para esta aplicación particular seguramente es todavía prematura.

• **¿Qué mensaje puede transmitir al sector fabricante español de PVC sobre estas nuevas investigaciones y su repercusión en los sistemas de producción que actualmente mantienen?**

Necesitamos mejorar la síntesis para mejorar todo el sistema de producción de PVC. Seguramente sistemas basados en materiales como los que proponemos constituyen un paso adelante en la mejora. En un periodo más largo de tiempo, espero ver otros productos reemplazando también al propio PVC por alternativas más sostenibles.

lizadores nanoestructurados y de un solo átomo utilizando diferentes metales soportados en carbono, como Au, Pt, Anar, Rh y Pd. Teniendo en cuenta tanto la sensibilidad estructural (diferencias en la actividad química de los átomos de un catalizador de metal soportado) de los diferentes metales individuales, así como sus interacciones con el soporte de carbono, los científicos se propusieron evaluar el comportamiento de los catalizadores en las condiciones de reacción y su desempeño general en la reacción de hidroclicación de acetileno.

Los resultados mostraron tal diversidad en la estructura del sitio activo y de jerarquía de actividad, que resultó un gran desafío identificar un parámetro que pudiera usarse como descriptor para guiar el descubrimiento de catalizadores. Para lograr su objetivo, los científicos reunieron a un equipo multidisciplinario y se dispusieron a realizar estudios cinéticos transitorios y de estado estacionario, así como análisis de quimisorción y modelado por DFT en su plataforma de catalizadores. Para su deleite, todas

Sobre el Instituto Catalán de Investigación Química (ICIQ)

ICIQ es un centro de investigación en química de prestigio internacional. El instituto cuenta con 16 grupos de investigación que trabajan en catálisis (desarrollo de procesos químicos más eficientes), captura de CO₂ (usar el CO₂ de la atmósfera para producir productos de valor añadido como plásticos o fármacos), energías renovables (fotosíntesis artificial, celdas solares, biocombustibles) y química computacional (simulación de fenómenos químicos por ordenador). Los investigadores de ICIQ han obtenido 22 proyectos del European Research Council (ERC Grants) y siete de sus investigadores son profesores ICREA. ICIQ es un centro CERCA y miembro del Barcelona Institute of Science and Technology.

las técnicas apuntaban al mismo parámetro para ser utilizado como descriptor: la energía de adsorción del acetileno.

Para los científicos, la integración de las diferentes metodologías utilizadas garantiza la solidez del descriptor identificado, proporcionando implicaciones relevantes para el diseño de catalizadores. *“La racionalización del rendimiento catalítico*

hasta el nivel atómico solo es posible mediante la integración de síntesis, caracterización y modelado”, explica la profesora López. Llevando los hallazgos un paso más allá, la nueva estrategia también es aplicable a las reacciones catalizadas por metales soportados, proporcionando un marco único para obtener descriptores catalíticos para una amplia gama de reacciones. 