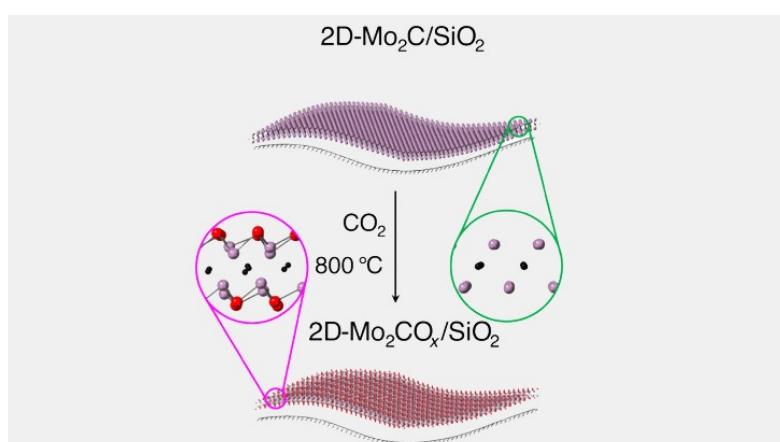


20/10/2020

## Catalizadores bidimensionales para convertir el CO<sub>2</sub> en un producto de mayor valor añadido



Un equipo internacional de científicos en el que ha participado el investigador Aleix Comas Vives ha conseguido acelerar la transformación de dióxido de carbono y metano, dos gases que contribuyen al calentamiento global, en monóxido de carbono e hidrógeno, una mezcla con valor añadido, mediante láminas de Mxens, un innovador catalizador bidimensional.

La reacción de reformación seca del metano transforma el dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) y el metano (CH<sub>4</sub>) en una mezcla de CO y H<sub>2</sub>.



Esta reacción permite alcanzar dos objetivos. En primer lugar, permite valorizar el CO<sub>2</sub> y el CH<sub>4</sub>, dos componentes que contribuyen en gran medida al calentamiento global del planeta. Por otra parte, la reacción forma un producto de más alto valor añadido, una mezcla de CO y H<sub>2</sub> que se llama gas de síntesis, que como su nombre indica sirve de punto de partida para sintetizar un gran número de moléculas que contienen carbono: hidrocarburos, alcoholes, etc.

Generalmente, la reacción de reformación seca del CO<sub>2</sub> acelera (se cataliza, en términos químicos) mediante catalizadores metálicos formados por metales de transición, sobre todo de níquel a nivel industrial.

El níquel, sin embargo, presenta problemas, porque a lo largo de la reacción se forma carbono que se adsorbe en su superficie, y éste se desactiva a lo largo de la reacción. Resulta, por tanto, atractivo desarrollar nuevos materiales que permitan acelerar la reacción y sirvan de alternativa al níquel o los metales de transición. Los carburos metálicos basados en molibdeno (Mo<sub>2</sub>C) son materiales atractivos para este propósito, pero también se desactivan, en este caso mediante oxígeno adsorbido en su superficie.

En este trabajo, fruto de una colaboración del grupo teórico liderado por el investigador "Ramón y Cajal" Aleix Comas Vives, del Departamento de Química de la Universitat Autònoma de Barcelona, y el grupo del profesor Christoph Mueller y del doctor Alexey Fedorov, de la Escuela Politécnica de Zurich (ETH Zurich), hemos conseguido sintetizar y entender cómo opera un catalizador bidimensional de Mo<sub>2</sub>C a escala nanométrica de la familia MXens, cuando se depositan sobre SiO<sub>2</sub>. El catalizador es activo en la reacción y su morfología permite superar las limitaciones tradicionales del Mo<sub>2</sub>C.

Este compuesto, formado por láminas muy finas, de Mo-C-Mo sobre el CO<sub>2</sub>, a diferencia del Mo<sub>2</sub>C se activa por deposición de oxígeno en la superficie, formándose Mo<sub>2</sub>CO<sub>x</sub>. Esto se consigue mediante el contacto del material con CO<sub>2</sub> a 800 grados centígrados. El material resultante permite acelerar la reacción de reformación seca del metano con una actividad similar a la del níquel. Este catalizador Mo<sub>2</sub>CO<sub>x</sub>, tiene la ventaja de que, a pesar de desactivarse, es decir hacerse menos eficiente durante la reacción, se puede volver a "activar" si se vuelve a poner en contacto con CO<sub>2</sub>, hecho sin precedentes en materiales de este tipo. Esto permite alternar ciclos de reacción de reformación seca del metano con ciclos de reactivación del material con CO<sub>2</sub> a otra temperatura.

Los cálculos teóricos han permitido saber la composición del catalizador en los diferentes ciclos de reacción y saber cómo tiene lugar la reacción a escala atómica. En este sentido, se ha visto que romper la molécula del metano es el paso clave de la reacción de reformación seca del metano.

### Aleix Comas

Investigador Ramón y Cajal  
Departamento de Química  
Universitat Autònoma de Barcelona  
[Aleix.Comas@uab.cat](mailto:Aleix.Comas@uab.cat)

### Referencias

Alexey Kurlov, Evgeniya B. Deeva, Paula M. Abdala, Dmitry Lebedev, Athanasia Tsoukalou, Aleix Comas-Vives, Alexey Fedorov & Christoph R. Müller, **Exploiting two-dimensional morphology of molybdenum oxycarbide to enable efficient catalytic dry reforming of**

**methane.** *NATURE COMMUNICATIONS* (2020) <https://doi.org/10.1038/s41467-020-18721-0>

[View low-bandwidth version](#)