

Producción de mezclas CH₄/H₂ a temperatura ambiente por activación mecánica de MgH₂-Li₂CO₃

Grasso María L.^{1*}, Fernández Albanesi Luisa^{1,2}, Garroni Sebastiano³, Mulas Gabriele³ y Gennari Fabiana^{1,2}

¹Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, Godoy Cruz 2290 (C1425), Buenos Aires, Argentina.

²Centro Atómico Bariloche (CAB-CNEA)- Instituto Balseiro, Av. Bustillo 9500 (8400), S.C. de Bariloche, Río Negro, Argentina.

³Dipartimento di Chimica e Farmacia (UNISS), Via Vienna 2 (07100), Sassari, Italia.

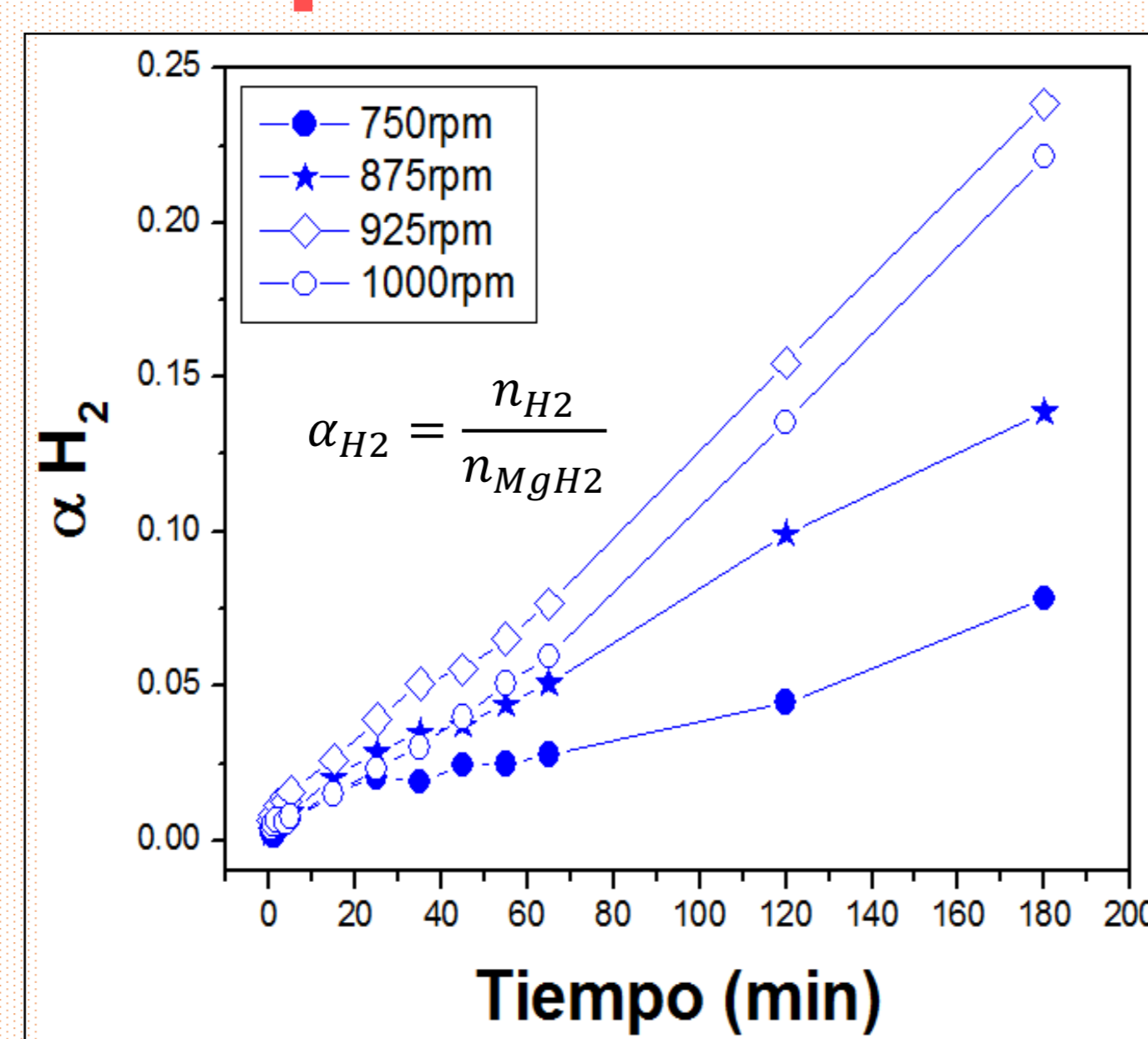
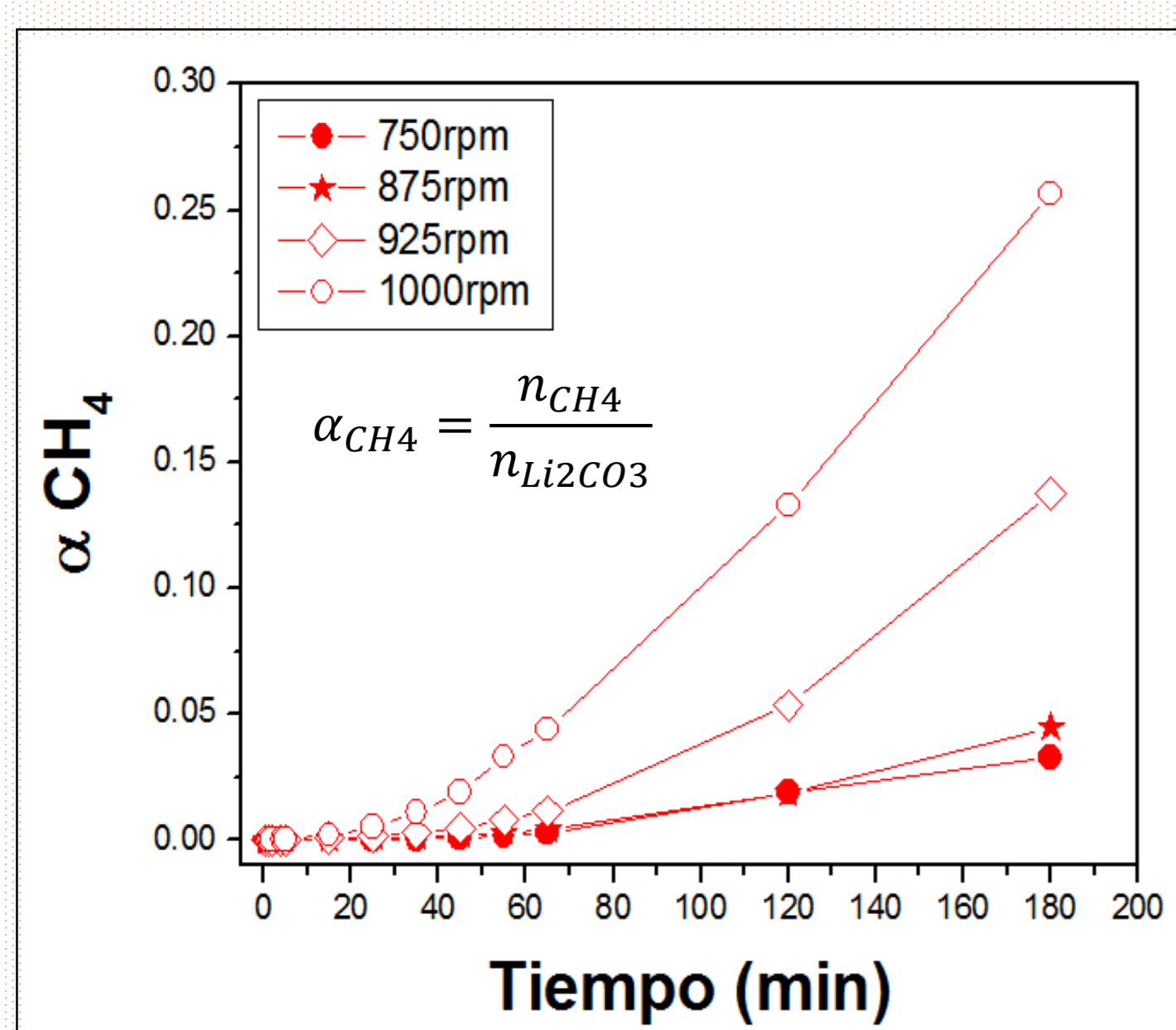
grassomarialaura@gmail.com

En el escenario actual debido a las emisiones de CO₂ a la atmósfera, la captura y reutilización de CO₂ para la producción de compuestos de interés industrial (por ejemplo, combustibles sintéticos), resulta una alternativa promisorio (*Rafiee et al. 2018*). Con el interés de vincular la conversión del CO₂ a la producción de compuestos de valor, se propone el uso de carbonatos e hidruros como portadores de CO₂ y de H₂. En este trabajo, se estudia el procesamiento mecanoquímico del sistema MgH₂-Li₂CO₃ empleando un molino de bolas de alta energía a diferentes velocidades de rotación, tiempos, a temperatura ambiente y sin catalizador. Adicionalmente, los resultados experimentales se comparan con cálculos termodinámicos de minimización de la energía libre de Gibbs.

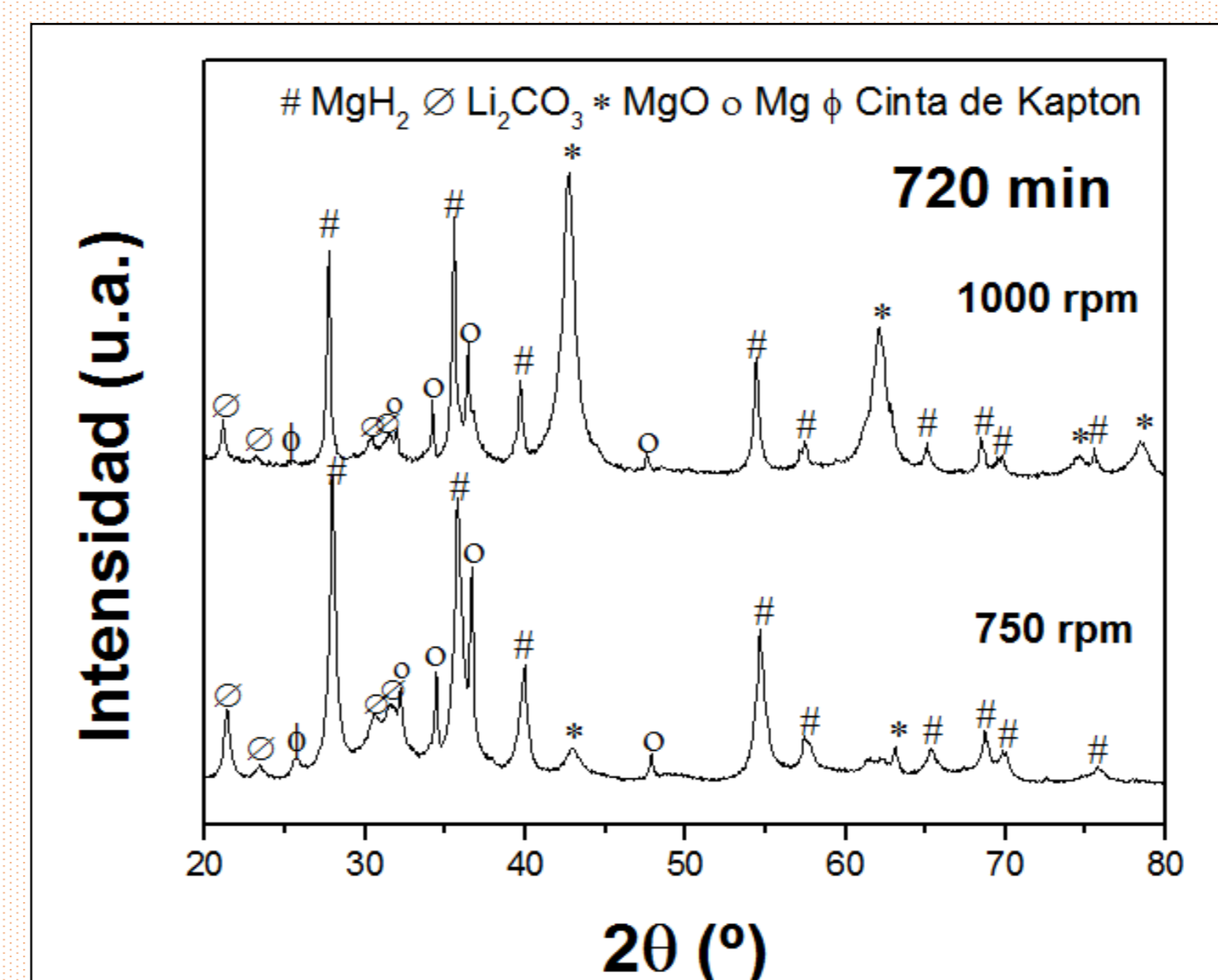
Parte experimental

Se prepararon mezclas de Li₂CO₃ y MgH₂ en una relación molar 1:4, las cuales fueron molidas mecánicamente a temperatura ambiente y bajo 1 atm de Ar. El procesamiento mecánico fue realizado en un molino SPEX a diferentes tiempos (hasta 720 minutos) y velocidades de rotación (750, 875, 925 y 1000 rpm). Luego, las muestras obtenidas fueron caracterizadas por técnicas estructurales, microestructurales y químicas (XRD, espectroscopias de infrarrojo y Raman, SEM-EDXS y GC). Los resultados obtenidos fueron comparados con cálculos termodinámicos usando el software HSC Chemistry v. 6.12.

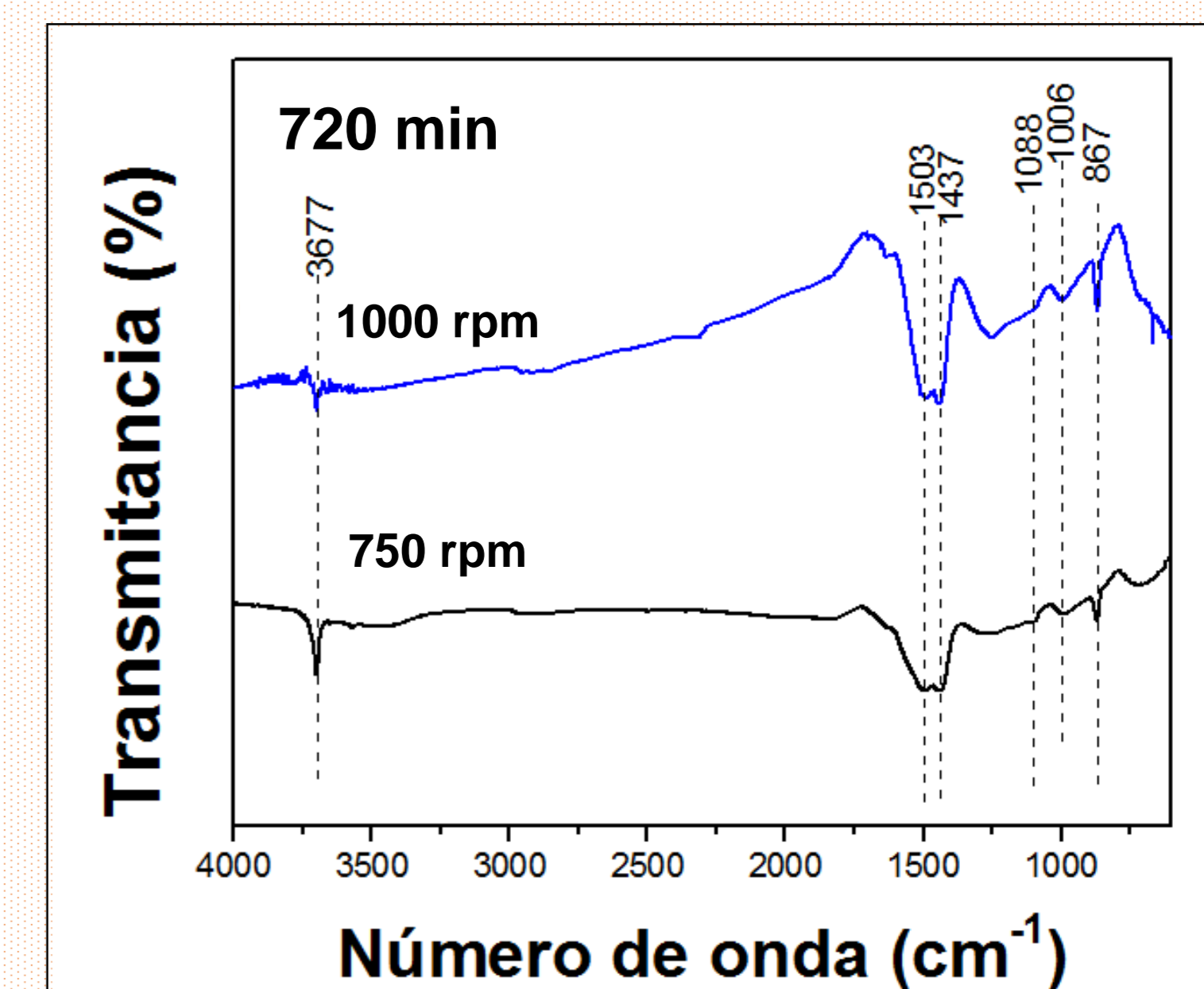
Cuantificación por GC



Resultados XRD

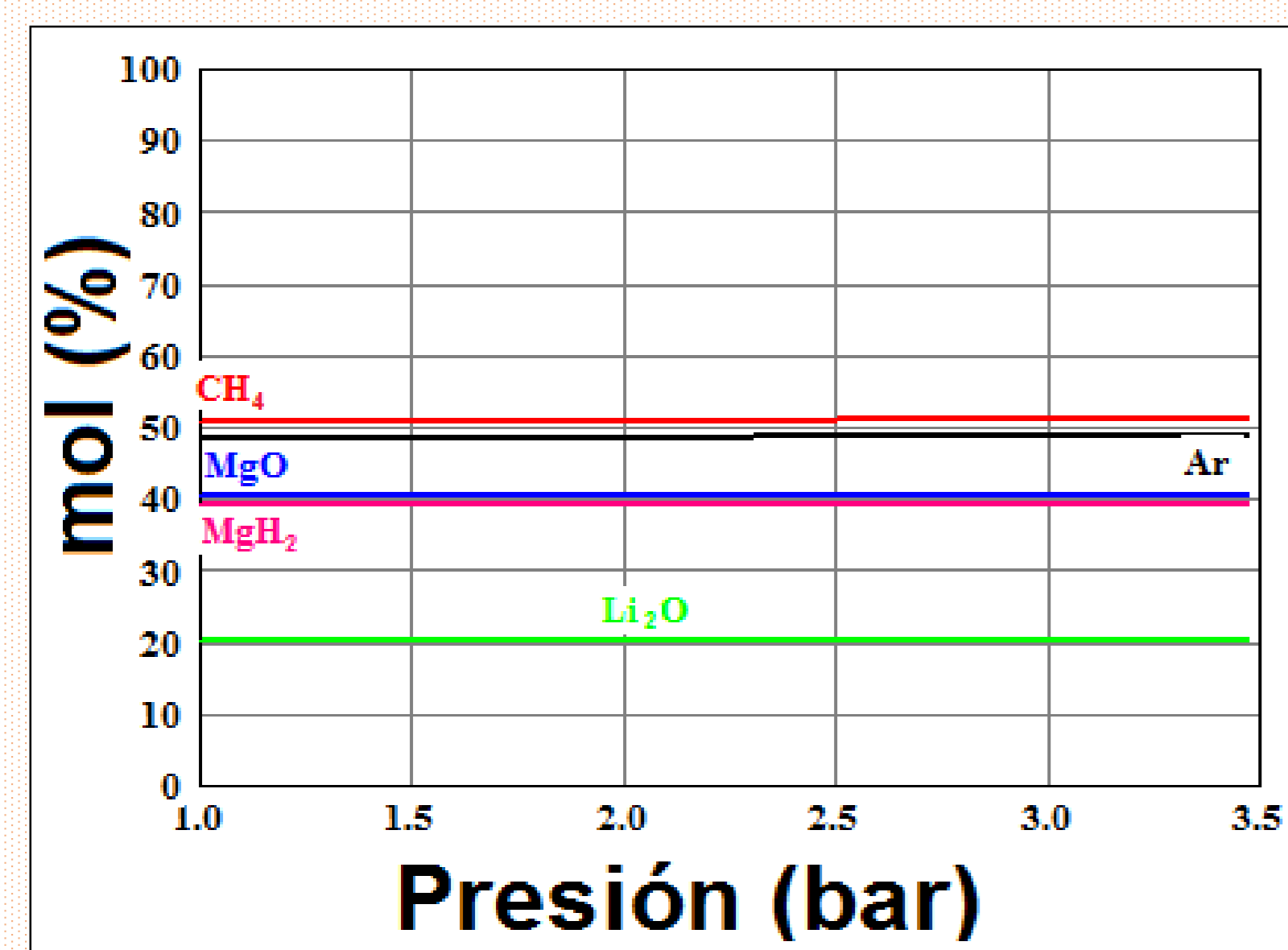


FTIR

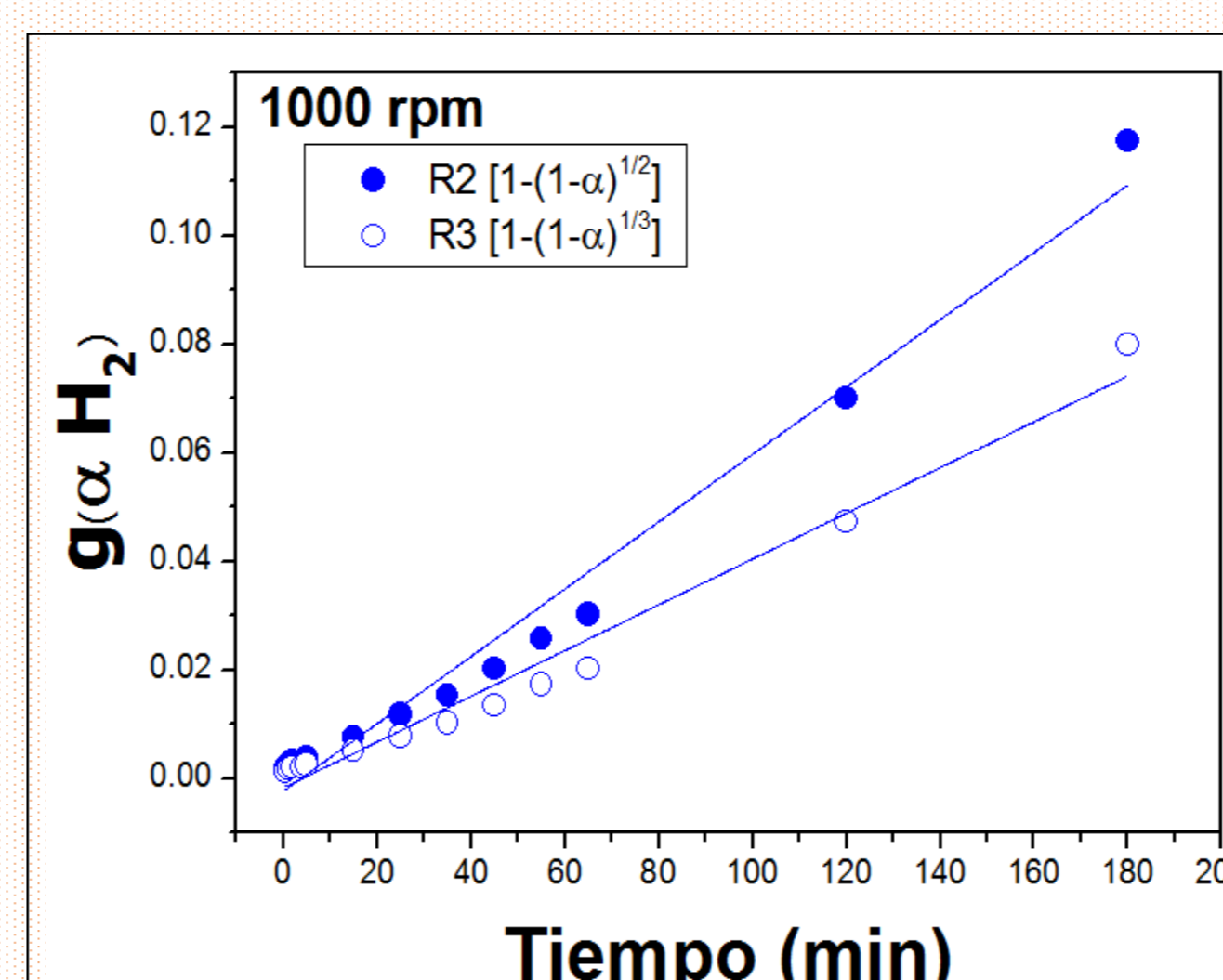
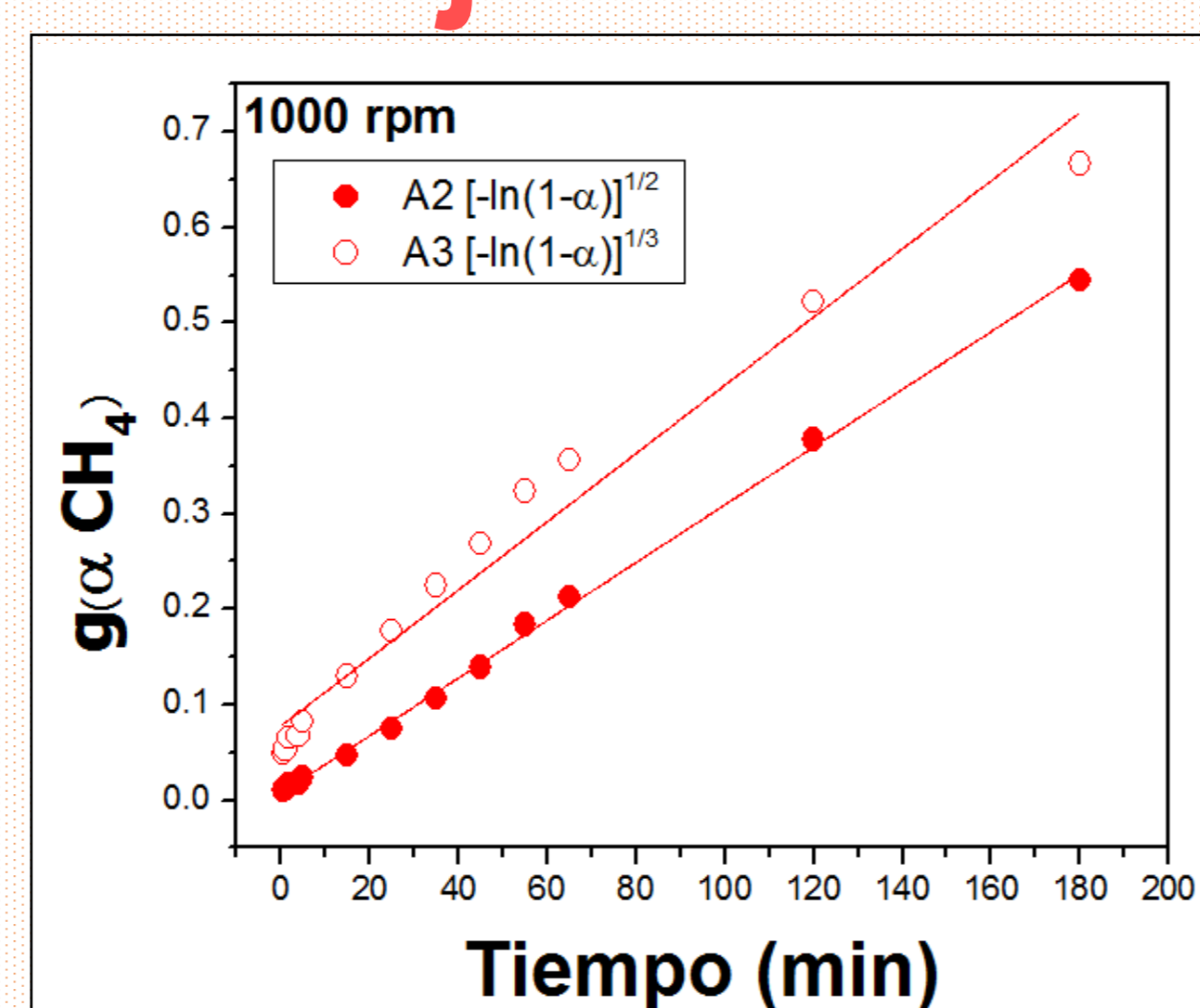


Cálculos termodinámicos

La evidencia experimental muestra la formación progresiva de MgO y Li₂O en la fase sólida, y de CH₄ e H₂ en la fase gas a diferentes velocidades de rotación y tiempos de molienda, en concordancia con lo predicho por la termodinámica, excepto por la presencia de H₂.



Ajuste con modelos teóricos



Los valores de α para CH₄ e H₂ fueron ajustados usando modelos cinéticos teóricos de nucleación y crecimiento, y modelo de volumen contráctil, respectivamente.

Conclusiones

Se concluye que el procesamiento mecanoquímico del sistema MgH₂-Li₂CO₃ a temperatura ambiente y en ausencia de catalizadores puede ser empleado para la producción de mezclas combustibles de CH₄/H₂ usando portadores de H₂ y CO₂ (*Grasso et al. 2020*). Se propone un esquema que integre el procesamiento mecánico descrito con la captura de CO₂, para la reutilización de dicho gas.