

Materiales sólidos utilizados en la captura de gases de efecto invernadero: CO₂ y jerarquización

Ana Yañez -Aulestia

*Fisicoquímica de Superficies, Departamento de Química,
Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, México.*

Resumen

El estudio de las interacciones entre sólidos y gases es parte importante en la fisicoquímica de superficies, correlacionándose fuertemente con el diseño de materiales sólidos para la captura de gases como el CO₂. Comprender esas interacciones, incluyendo su afinidad, su impacto en la capacidad de adsorción, estabilidad y regenerabilidad en diferentes condiciones ambientales, es esencial para el desarrollo de materiales efectivos en la captura de gases y compuestos de efecto invernadero. En este contexto, en este trabajo se examina el impacto de los gases, centrándose en el CO₂, y cómo el diseño de materiales sólidos jerarquizados permite modificar y generar cambios estructurales que influyen significativamente en la adsorción de gases.

Palabras clave: adsorbentes, adsorción, CO₂, MOFs.

Abstract

The study of interactions between solids and gases is fundamental in the physical chemistry of surfaces, particularly in the design of solid materials for gas capture, such as CO₂. Understanding how gaseous molecules interact with the material surface, including their affinity and impact on adsorption capacity, stability, and reusability under different environmental conditions, is essential for developing effective materials for gas and greenhouse gas compound capture. In this context, the impact of greenhouse gases and compounds, focusing on CO₂, is examined, and how the design of hierarchical solid materials allows for generating structural changes that significantly influence gas adsorption.

Keywords: adsorbents, adsorption, CO₂, MOFs.

Introducción

El diseño y la aplicación de diferentes materiales sólidos para reducir la contaminación de gases y compuestos de efecto invernadero (GyCEI) mediante el proceso de adsorción es un tema cada vez más importante en el campo de la ciencia y la ingeniería medioambientales. La captura de estos contaminantes gaseosos es de vital importancia para mitigar el cambio climático y reducir los impactos ambientales, como contribuir a limitar el aumento de la temperatura global.

La ciencia que se encarga del estudio de las interacciones de estos sólidos con los gases es la fisicoquímica de superficies ya que, el diseño de materiales sólidos implica entender cómo las moléculas gaseosas como las de CO₂ interactúan con la superficie del material. Esto incluye aspectos como la afinidad del material por las moléculas gaseosas, la capacidad de adsorción y desorción, así como la estabilidad del material en diferentes condiciones ambientales. Comprender estos aspectos es fundamental para desarrollar materiales efectivos para la captura de gases o compuestos de efecto invernadero.

En este trabajo se expone brevemente el impacto de los gases y compuestos de efecto invernadero, los materiales sólidos utilizados para captura de estos contaminantes con especial atención en el CO₂ y como el diseño de estos materiales permite la jerarquización de estos para generar cambios en su estructura que a su vez se reflejan en cambios importantes en la adsorción de gases, permitiendo una visión general de una de las líneas de investigación de la autora de este trabajo.

Gases y Compuestos de Efecto Invernadero

Los GyCEI son moléculas gaseosas presentes en la atmósfera, tanto de origen natural como producido por el ser humano, que absorben y emiten radiación infrarroja proveniente de la superficie terrestre en determinadas longitudes de onda. El fenómeno del efecto invernadero es un proceso natural en la atmósfera terrestre, esencial para mantener las condiciones de vida en el planeta, ya que, sin él, la temperatura promedio de la Tierra sería mucho más baja (menor a -18°C) (INECC, 2024). Entre los principales GyCEI presentes en la atmósfera se encuentran el vapor de agua (H₂O), el dióxido de carbono (CO₂), el óxido nitroso (N₂O), el metano (CH₄) y el ozono (O₃). También existen los de producción indirecta como los óxidos de nitrógeno (NO_x), el monóxido de carbono (CO), y algunos compuestos orgánicos de cadena corta, diferentes al metano definidos como compuestos orgánicos volátiles (COV) que incluyen gases como el butano, propano y etano (Benavides, 2017).

El incremento significativo en las concentraciones de gases como el CO₂, CH₄ y NO_x en la atmósfera, junto con la acidificación de los océanos y el aumento de la temperatura global, evidencian el impacto de la actividad humana en los sistemas ambientales y geoquímicos a nivel mundial. A pesar de los esfuerzos por implementar políticas de mitigación del cambio climático, las emisiones totales de GyCEI de origen antropogénico continúan aumentando debido principalmente al crecimiento económico y demográfico, que impulsan el uso de combustibles fósiles en sectores como la calefacción, generación de electricidad, transporte e industria (Calvin, 2023). En el caso particular de México, éste contribuyó con el 1.76% de las emisiones globales de dióxido de carbono en 2022, que

corresponde a 952.92 de un total global de 53850.00 Megatoneladas a nivel mundial, expresadas en equivalente de CO₂. Sin embargo, es un país de importancia en el contexto de las acciones de mitigación internacional, siendo el 13^o mayor emisor de GyCEI. En las dos décadas (2000-2020) las emisiones totales de GyCEI ascendieron a 694,305.6 Gg CO₂ e /año en promedio (INECC, 2024; Jones, 2024).

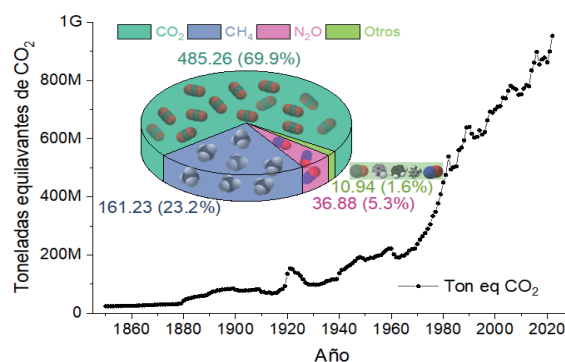


Figura 1. Las emisiones de gases de efecto invernadero reportadas en toneladas equivalentes de dióxido de carbono desde 1850 a 2022 y los gases y compuestos de efecto invernadero como balance anual promedio entre 2000-2020 en México. Elaborado con información de Jonas 2024, INEGYCEI 1990-2019, e INECC 2024.

Enfoques para captura de CO₂ y otros gases contaminantes

Considerando esta problemática, se han reportado considerables investigaciones donde se proponen diferentes tecnologías que se basan principalmente en cuatro enfoques para capturar principalmente CO₂ y otros gases: destilación criogénica, purificación con membranas, absorción con líquidos y adsorción con sólidos. Por un lado, la destilación criogénica es comúnmente utilizada en la separación de gases; sin embargo, el condensar CO₂ a

temperaturas muy bajas para producir CO₂ líquido y luego almacenarlo representa un alto consumo energético, por lo que no se considera como un método práctico para separarlo de los gases de combustión (Aaron, 2005). Las membranas, por otro lado, han sido objeto de amplios estudios para separar el CO₂ de fuentes relativamente concentradas, como depósitos de gas natural o en procesos de separación que involucran corrientes de CO₂ con presiones relativamente altas, como ocurre en la captura de precombustión (Sridhar, 2007). No obstante, para la captura posterior a la combustión, donde el CO₂ es un componente minoritario de los gases de escape, es poco factible que las membranas sean la opción más eficiente para la separación. En cuanto a los procesos de absorción que implican la captura de CO₂ utilizando medios líquidos están bien establecidos. Estos medios líquidos suelen ser soluciones acuosas de aminas, como la etanolamina, u otros fluidos básicos (pH>7), como el amoníaco en frío, que absorben químicamente los gases ácidos (Danckwerts, 1979). Además, existen procesos comerciales que se basan en la absorción física, utilizando metanol o éter dimetílico de poli-etilenglicol como fases de absorción (Sircar, 2006). Finalmente, se consideran los procesos de adsorción para la separación de gases mediante adsorción selectiva en medios sólidos (Yang, 1997).

Adsorción de gases en materiales sólidos

La adsorción se refiere al proceso por el cual las moléculas de una sustancia se adhieren a una superficie, creando una película del adsorbato (sólido) sobre el adsorbente (gas) donde operan fuerzas superficiales (Figura 2). Los adsorbentes sólidos

pueden interactuar a través de procesos de adsorción física (fisisorción) o adsorción química (quimisorción) (IUPAC, 1997). La primera, implica interacciones de tipo van der Waals, es reversible y conserva la identidad del adsorbato; mientras que la segunda involucra interacciones fuertes y la pérdida de la identidad química del adsorbato. En ambos casos se pueden utilizar procesos cíclicos o multimodulares de adsorción y desorción, con desorción inducida por presión o temperatura.

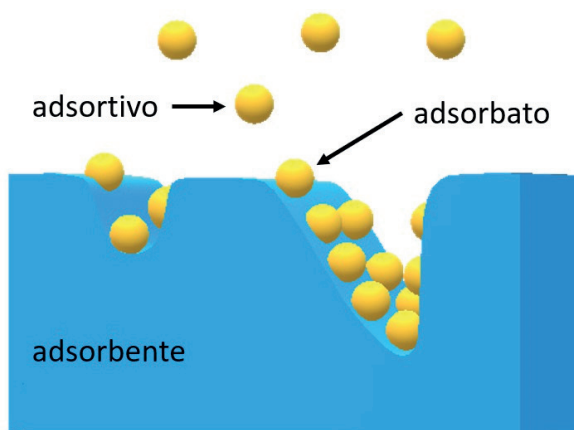


Figura 2. Representación de los elementos en la adsorción, específicamente la adsorción de un gas en un sólido.

Los adsorbentes sólidos se evalúan según su capacidad de adsorción o captura, temperatura de operación, cinética de adsorción-desorción, estabilidad y regenerabilidad. A lo largo de los años se han propuesto diversos tipos de materiales como posibles adsorbentes de CO₂, incluyendo zeolitas, sílices, alúminas, carbones activados, hidrotalcitas, polímeros, estructuras metal-orgánicas, óxidos alcalinos y alcalinotérreos, y compuestos cerámicos (Choi, 2009).

Si consideramos la interacción del sólido con el gas, entre los materiales que rea-

lizan adsorción física, se encuentran las zeolitas, conocidas por su capacidad de adaptar su composición química y distribución de poros, y los carbones activados, cuya estructura porosa debe ser controlada para lograr una alta adsorción de CO₂. Las estructuras metal-orgánicas, como los polímeros de coordinación porosos (PCP) o también conocidos como MOFs (metal-organic frameworks, por sus siglas en inglés) presentan buena capacidad de adsorción y selectividad de CO₂ dependiendo de varios factores, como la estructura de los poros y la presencia de sitios metálicos y grupos funcionales presentes. En cuanto a los materiales que pueden realizar quimisorción, las hidrotalcitas son compuestos con gran área superficial, abundantes sitios básicos, estabilidad y fácil regeneración, y trabajan a temperaturas moderadas. Los óxidos alcalinos y alcalinotérreos reaccionan con el CO₂ formando carbonatos; entre los más utilizados están los óxidos de calcio y magnesio. Los materiales cerámicos también son capaces de quimisorber CO₂ en un amplio intervalo de temperaturas, utilizando principalmente metales alcalinos (Dziejarski, 2023; Wang, 2011).

Con la gran variedad de materiales sólidos, su diseño es crucial para mejorar sus propiedades y por lo tanto sus aplicaciones. Una buena opción al diseñar materiales es la jerarquización.

Jerarquización en sólidos adsorbentes

La conceptualización más sencilla de la estructura jerárquica es descriptiva porque implica reconocer que las características estructurales que se dan en diferentes escalas de tamaño y que el nivel de sofisticación de esa misma estructura incre-

menta dependiendo de las modificaciones que se puedan realizar en ella como se esquematiza en el Figura 3, presentando varias ventajas (Lakes, 1993; Su, 2012):

- **Optimización de propiedades:** La jerarquización permite diseñar materiales con estructuras porosas en múltiples escalas, desde micro (< 2 nm), meso (2–50 nm) hasta macroporos (450 nm). Los múltiples niveles de tamaño de poro generalmente comprenden bimodalidades como micro-meso, meso-macro y micro-macro, o incluso trimodales como micro-meso-macro y meso-meso-macro. Esta modificación optimiza diversas propiedades, como la superficie específica, la capacidad de carga, la conductividad, la reactividad química y mayor capacidad de adsorción de gases.
- **Mejora del desempeño:** Al integrar diferentes niveles de porosidad, se puede mejorar el desempeño de los materiales en aplicaciones específicas, como almacenamiento de energía, catálisis y sensores, al proporcionar una mayor área de superficie y caminos de transporte optimizados para las especies relevantes.
- **Flexibilidad y versatilidad:** La jerarquización ofrece flexibilidad y versatilidad en el diseño de materiales, los bloques de construcción individuales de un material, que a menudo se agrupan en diferentes subdominios y dominios, suelen considerarse elementos estructurales en los materiales jerárquicos. Esto permite ajustar y optimizar las propiedades en función de los requisitos específicos de cada aplicación.

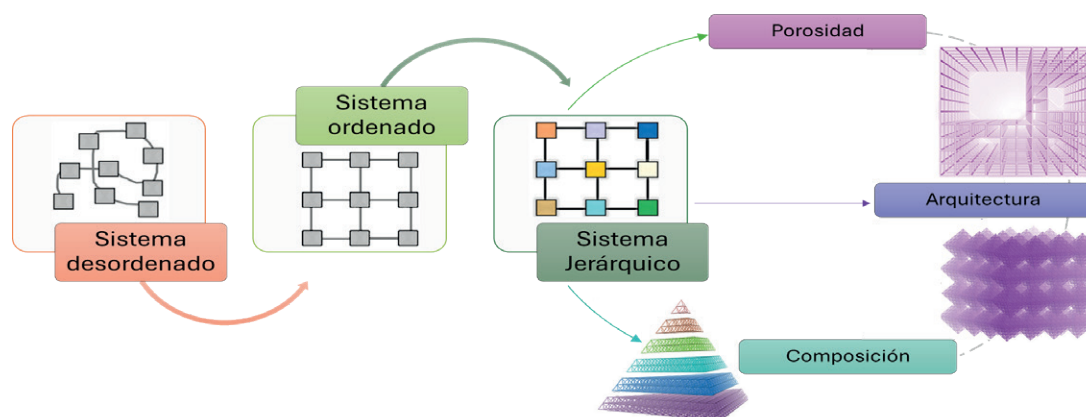


Figura 3. Esquema conceptual de la jerarquía y algunas de las propiedades que se pueden diseñar en los materiales sólidos mediante la jerarquización. Basada en lo reportado por Feng, 2020.

De entre todos los sólidos adsorbentes, los enrejados metal-orgánicos presentan propiedades altamente diseñables, ya que las combinaciones de sus componentes generan múltiples estructuras.

Enrejados metal-orgánicos (MOFs) y la jerarquización

Los MOFs son una clase de materiales cristalinos funcionales que han recibido una atención creciente las últimas décadas. Tienen un componente inorgánico que son los centros metálicos (nodos) y un componente orgánico que son los ligantes. Debido a la gran variedad de moléculas orgánicas y nodos metálicos adecuados, ya se han descrito más de 70.000 estructuras cristalinas de MOFs diferentes. Sus propiedades son altamente diseñables porque la naturaleza modular de los MOFs permite la manipulación de topologías, porosidades, funcionalidades y propiedades superficiales (Cai, 2021).

Para lograr estas modificaciones existen varias estrategias como son: el combinar ligantes, combinar centros metálicos, ampliar o disminuir el tamaño del ligante, ex-

traer ligantes o solventes de la estructura después de la síntesis, utilizar un soporte, modificar la velocidad de formación de cristal, formar geles, entre otros.

Por definición los MOFs son intrínsecamente porosos donde la estructura enrejada contiene huecos potenciales que van de micro a mesoporos. Estos huecos potenciales representan la porosidad primaria. La introducción de otra porosidad a una escala de longitud mayor crea materiales jerárquicamente porosos. El propósito de construir MOFs jerárquicamente porosos mediante alguna de las estrategias anteriormente descritas, es satisfacer las diferentes necesidades de sus aplicaciones prácticas, como su uso en la adsorción de gases. Donde las diferencias en el tamaño de los poros por la presencia de más canales en los cristales de los MOFs jerárquicamente porosos, suele mejorar la adsorción de gases, cambiar la forma en el que el gas difunde en el sólido, y la velocidad de transferencia de masa. Estos cambios generados permiten entonces una adsorción selectiva, la separación o una mejorar en la captura de los gases (por ejemplo,

CO₂, N₂, CH₄, H₂, entre otros) (Kabtamu, 2020; Xiong, 2022; Yin, 2022).

Por todo lo anteriormente expuesto, la intersección entre la fisicoquímica de superficies y los MOFs porosos jerárquicos es un campo de estudio fascinante que abre nuevas fronteras en la captura de CO₂ y otras aplicaciones medioambientales. La comprensión profunda de las interacciones superficiales y la estructura porosa de los MOFs permite diseñar materiales altamente eficientes para la adsorción selectiva de CO₂. La ingeniería precisa de estos materiales, guiada por los principios de la fisicoquímica de superficies, resulta en una capacidad mejorada de captura y una mayor estabilidad bajo diversas condiciones ambientales. Esta simbiosis entre la fisicoquímica de superficies y los MOFs jerárquicamente porosos promete soluciones innovadoras y sostenibles para abordar los desafíos del cambio climático y la preservación del medio ambiente.

Conclusión

Uno de los principales retos en el campo de la adsorción de GyCEI es el estudio y mejora de los procesos de adsorción para aplicaciones industriales. Las y los investigadores trabajan en el desarrollo de sistemas de adsorción escalables y rentables que puedan integrarse en los procesos industriales existentes para capturar y almacenar gases de efecto invernadero. Por un lado, la optimización de parámetros de adsorción como la temperatura, la presión y la concentración del gas es crucial para conseguir altas capacidades de adsorción y eficiencias en aplicaciones a gran escala. Y, por otro lado, el diseño de materiales sólidos y la jerarquización son fundamentales para el avance tecnológico, la innovación sostenible y la resolución de desafíos globales, al permitir

la creación de materiales con propiedades optimizadas no solo para la adsorción que es un paso fundamental en catálisis, sino para una amplia gama de aplicaciones.

Agradecimientos

La autora agradece al Departamento de Química de la UAM-Iztapalapa por la oportunidad de desarrollarme y contribuir en el Área Académica de Fisicoquímica de Superficies y a Dr. E. Sánchez-González por el apoyo y asistencia técnico-científica en varios aspectos del proyecto.

Referencias

- Aaron, D., y Tsouris, C. Separation of CO₂ from Flue Gas: A Review. *Sep Sci Technol*, 40(1–3), 321–348, 2005. <https://doi.org/10.1081/SS-200042244>
- Benavides Ballesteros, H., y León Aristizabal, G. Información técnica sobre Gases de Efecto Invernadero y el cambio climático. En *Ideam* (pp. 1–102), 2007. <https://doi.org/IDEAM-METEO/008-2007>
- Cai, G., Yan, P., Zhang, L., Zhou, H., y Jiang, H. Metal-Organic Framework-Based Hierarchically Porous Materials: Synthesis and Applications. *Chem Rev*, 121(20), 12278–12326, 2021. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.1c00243>
- Calvin, K., et al. (2023). IPCC, 2023: *Climate Change 2023: Synthesis Report. Contribution of Working Groups I, II and III to the Sixth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change*. IPCC, Geneva, Switzerland. 2023. <https://doi.org/10.59327/IPCC/AR6-9789291691647>
- Choi, S., Drese, J. H., y Jones, C. W. Adsorbent materials for carbon dioxide cap-

- ture from large anthropogenic point sources. *ChemSusChem*, 2(9), 796–854, 2009. <https://doi.org/10.1002/cssc.200900036>
- Danckwerts, P. The reaction of CO₂ with ethanolamines. *Chem Eng Sci*, 34(4), 443–446, 1979. [https://doi.org/http://dx.doi.org/10.1016/0009-2509\(79\)85087-3](https://doi.org/http://dx.doi.org/10.1016/0009-2509(79)85087-3)
- Dziejarski, B., Serafin, J., Andersson, K., y Krzyżyńska, R. CO₂ capture materials: a review of current trends and future challenges. *Mater Today Sustainability* (Vol. 24), Elsevier, 2023. <https://doi.org/10.1016/j.mtsust.2023.100483>
- Feng, L., Wang, K., Willman, J., y Zhou, H.-C. Hierarchy in Metal–Organic Frameworks. *ACS Cent Sci*, 6(3), 359–367, 2020. <https://doi.org/10.1021/acscentsci.0c00158>
- INECC. (2024, abril). *Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático*. Inventario Nacional de Emisiones de Gases y Compuestos de Efecto Invernadero INEGYCEI 2020-2021. <https://datos.gob.mx/busca/dataset/inventario-nacional-de-emisiones-de-gases-y-compuestos-de-efecto-invernadero-inegycei>
- IUPAC. (1997). The Golden Book, Compendium of Chemical Terminology. En *Blackwell Scientific Publications* (2^a ed.). <https://goldbook.iupac.org/index.html>
- Jones, et al. *National Contributions to Climate Change Due to Historical Emissions of Carbon Dioxide, Methane and Nitrous Oxide*, 2024. <https://doi.org/https://doi.org/10.5281/zenodo.10839859>.
- Kabtamu, D., Yi-nan, W., y Li, F. Hierarchically porous metal–organic frameworks: synthesis strategies, structure(s), and emerging applications in decontamination. *J Hazard Mater*, 397, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2020.122765>
- Lakes, R. Materials with structural hierarchy Roderic Lakes. En *Nature*, 361, 6412, 1993, pp. 511–515 <https://doi.org/10.1038/361511a0>
- Sircar, S. Basic Research Needs for Design of Adsorptive Gas Separation Processes. *Ind Eng Chem Res*, 45(16), 5435–5448, 2006. <https://doi.org/10.1021/ie051056a>
- Sridhar, S., Smitha, B., y Aminabhavi, T. Separation of Carbon Dioxide from Natural Gas Mixtures through Polymeric Membranes-A Review. *Sep Purif Rev*, 36(2), 113–174, 2007. <https://doi.org/10.1080/15422110601165967>
- Su, B., Sanchez, C., y Yang, X. *Hierarchically Structured Porous Materials: From Nanoscience to Catalysis, Separation, Optics, Energy, and Life Science*. John Wiley & Sons, 2012.
- Wang, Q., Luo, J., Zhong, Z., y Borgna, A. CO₂ capture by solid adsorbents and their applications: current status and new trends. *Energy Environ Sci*, 4(1), 42–55, 2011. <https://doi.org/10.1039/C0EE00064G>
- Xiong, Q., Chen, Y., Yang, D., Wang, K., Wang, Y., Yang, J., Li, L., y Li, J. (2022). Constructing strategies for hierarchically porous MOFs with different pore sizes and applications in adsorption and catalysis. En *Materials Chemistry Frontiers*, 6, 20. Royal Society of Chemistry, 2022. pp. 2944–2967. <https://doi.org/10.1039/d2qm00557c>

Yang, R. Gas separation by adsorption processes. *Imperial College Press*. Imperial College Press, 1997.

Yin, X., Alsuwaidi, A., y Zhang, X. Hierarchical metal-organic framework

(MOF) pore engineering. En *Microporous and Mesoporous Mater*, 330. Elsevier, 2022. <https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2021.111633>