

Plan de Gestión de Datos

INFORMACION SOBRE EL PROYECTO	
1. – Título del Proyecto	
- Título del Proyecto (en castellano)	
Nanoingeniería en catalizadores para aplicaciones sustentables tendientes a reducir las emisiones de CO ₂	
- Título del Proyecto (en inglés)	
Nanoengineering of catalysts for sustainable applications aimed at reducing CO ₂ emissions	
-Descripción del Proyecto (en castellano) Resumen	
<p>Uno de los grandes desafíos que enfrentamos como sociedad es la necesidad de cambiar de una economía basada en recursos fósiles no renovables a una basada en fuentes renovables para revertir las crecientes emisiones de CO₂. Es por eso que se deben desarrollar procesos sostenibles para la producción de químicos y combustibles. En ese ámbito, la catálisis heterogénea y la nanoingeniería tienen un papel central ya que es necesario crear nanomateriales con control preciso sobre el tamaño, la forma, la composición y la estructura de estos de modo de optimizar su desempeño catalítico.</p> <p>En ese contexto, el objetivo principal de este proyecto es contribuir a la generación de conocimiento fundamental para el desarrollo de catalizadores nanoestructurados, principalmente basados en Cu, con un desempeño catalítico mejorado hacia las reacciones de (i) hidrogenación de CO₂ a metanol, (ii) valorización de (bio)etanol, y (iii) carbonilación de alcoholes para la producción de dialquilcarbonatos.</p> <p>Así, se plantea el diseño y síntesis de: “catalizadores inversos” CeO_x/Cu@Cu₂O con morfología controlada (nanocubos/nanooctaedros) y catalizadores ultradispersos de Cu soportado sobre capas delgadas –epitaxiales- de CeO₂ sobre nanoplacas de MgO, que maximicen la interfaz Ce-Cu con el fin de mejorar el desempeño catalítico en el reciclado de CO₂ a baja temperatura; y catalizadores de Cu soportados sobre nanofibras de CeO₂, ZrO₂, CeO₂@ZrO₂-NF, y óxidos metálicos mixtos (Ce-Ga-O y Cu-Ce-Ga-O), con propiedades ácido-base diferenciadas que favorezcan la conversión de etanol en acetaldehído/butadieno y la carboxilación de metanol/etanol.</p> <p>Los catalizadores desarrollados serán caracterizados exhaustivamente en sus propiedades morfológicas, químicas, superficiales y redox, destacándose la caracterización nanoestructural y nano-analítica por medio de microscopía electrónica de transmisión de alta resolución (HRTEM). Además, se evaluará el desempeño catalítico bajo condiciones relevantes tecnológicamente, y se estudiarán las reacciones por medio de técnicas avanzadas de espectroscopia FTIR operando –bajo condiciones reales de reacción- para determinar los sitios activos, intermediarios claves y mecanismos de reacción.</p>	

Finalmente, se establecerán relaciones entre la estructura, características químicas de los sistemas explorados y su reactividad frente a las reacciones propuestas en este proyecto, de modo de contribuir al diseño de nuevos y mejores sistemas reaccionantes.

-Descripción del Proyecto (en inglés) Resumen

One of the great challenges we face as a society is the need to change from an economy based on non-renewable fossil resources to one based on renewable sources to reverse the growing CO₂ emissions. For this reason, sustainable processes must be developed for the production of chemicals and fuels. In this area, heterogeneous catalysis and nanoengineering play a key role since it is necessary to create nanomaterials with precise control over size, shape, composition and structure in order to optimize their catalytic performance.

In this context, the main objective of this project is to contribute to the generation of fundamental knowledge for the development of nanostructured catalysts, mainly based on Cu, with improved catalytic performance towards the reactions of (i) hydrogenation of CO₂ to methanol, (ii) valorization of (bio)ethanol, and (iii) carbonylation of alcohols for the production of dialkylcarbonates.

Thus, the design and synthesis of: (a) “inverse catalysts” CeO_x/Cu@Cu₂O with controlled morphology (nanocubes/nanooctahedrons) and ultradisperse Cu catalysts supported on thin –epitaxial- layers of CeO₂ on MgO nanoplates, to maximize the Ce-Cu interface in order to improve the catalytic performance for CO₂ recycling at low temperature; and (b) Cu catalysts supported on nanofibers of CeO₂, ZrO₂, CeO₂@ZrO₂-NF, and mixed metal oxides (Ce-Ga-O and Cu-Ce-Ga-O), with differentiated acid-base properties that favor the conversion of ethanol in acetaldehyde/butadiene and the carboxylation of methanol/ethanol, are proposed.

The developed catalysts will be exhaustively characterized in their morphological, chemical, surface and redox properties, highlighting the nano-structural and nano-analytical characterization by means of high-resolution transmission electron microscopy (HRTEM). In addition, the catalytic performance will be evaluated under technologically relevant conditions, and the reactions will be studied through advanced *operando* FTIR spectroscopy techniques -under real reaction conditions- to determine the active sites, key intermediates and reaction mechanisms.

Finally, relationships will be established between the structure, chemical characteristics of the systems explored and their reactivity against the reactions proposed in this project, in order to contribute to the design of new and improved catalysts.

-Palabras Clave descriptivas del Proyecto (en castellano)

catalizadores nanoestructurados
reciclado de CO₂
valorización de bioetanol

- Palabras Clave descriptivas del Proyecto (en inglés)

nanostructured catalysts

CO2 recycling
bioethanol valorization

2 – Datos del Director/ar del Proyecto

- Nombre y Apellido

Esteban Fornero

- Unidad Académica

INTEC / FICH

- Teléfono oficial de contacto

+54(342)4558450

-Teléfono móvil de contacto

+54(342)5213167

-E-mail del Director/a del Proyecto

elfornero@santafe-conicet.gov.ar

DATOS RESULTANTES DE LA EJECUCIÓN DEL PROYECTO

-Describa la toma de muestras / datos a realizar

Síntesis de nanomateriales: no tiene asociado la generación de datos.

Caracterización de los materiales por: (i) Absorción atómica/ICP (servicio arancelado de UNL) se obtiene un informe con datos de concentración de cada material como porcentaje en peso. (ii) Fisorción de LN2, TG, DSC, difracción de rayos X, y composición superficial y estado de oxidación de los elementos por espectroscopia fotoelectrónica de rayos X (XPS), que también se realizaran mediante servicios arancelados del CCT/UNL, se solicitaran los datos correspondientes a cada equipo como archivo de texto u hoja de cálculo. (iii) Propiedades redox (OSC) mediante técnicas la reducción a temperatura programada bajo flujo de H₂/He y CO/He con detección por espectrometría de masas (MS, Baltzer QMG421 y Pfeiffer Prisma 80), se recolectan datos de señal eléctrica en función del tiempo correspondiente a cada masa/carga (m/z) de los compuestos bajo estudio, los que serán guardados en formato compatible con software de lectura de datos (.txt o .asc). (iv) De los estudios de microscopía electrónica de transmisión de alta resolución (HRTEM), se obtendrán imágenes que se guardarán en formato .jpg o tiff.

Evaluación de desempeño catalítico: las señales obtenidas de los instrumentos analíticos de medición (Cromatografía de Gases y Espectrometría de Masas), que son proporcionales a las concentraciones para cada compuesto, serán exportados de los correspondientes instrumentos como archivo de textos u hojas de cálculo.

Intermediarios de reacción: las señales obtenidas por medio de FTIR serán exportadas de los correspondientes instrumentos como archivo de textos u hojas de cálculo.

Todos esos datos serán guardados en un disco rígido del grupo de trabajo.

– Datos: ¿Existe alguna razón por la cual los datos declarados no deban ser puestos a disposición de la comunidad / ser de acceso público? (marque X)	
	NO
X	SI. Elija una de las opciones:
	se encuentra en evaluación de protección por medio de patentes no se inició el proceso de evaluación de patentabilidad, pero podría ser protegible existe un contrato con un tercero que impide la divulgación Otro. Justifique.
– Período de Confidencialidad: Es el periodo durante el cual los datos no deberían ser publicados, contado a partir del momento de la toma de los mismos. El periodo máximo para la no publicación es de 5 (CINCO) años posteriores a su obtención. Luego de este periodo, los datos estarán disponibles para la comunidad / serán de acceso público. Si Ud. considera que este tiempo es insuficiente, y necesita prorrogar el período de confidencialidad, indique sus motivos y la cantidad de años adicionales que considera necesarios. Marque su opción con “X”.	
	1 (UN) año
	2 (DOS) años
	3 (TRES) años
	4 (CUATRO) año
X	5 (CINCO) años
	Otro.
	Motivos: Si las formulaciones de materiales obtenidas por este proyecto son tecnológicamente viables, se desarrollará una protección intelectual de las mismas, donde se pedirá apoyo y dirección a los organismos pertenecientes a la UNL y al CONICET. El Centro para la Transferencia de los Resultados de la Investigación (Cetri Litoral) de la UNL apoya a las facultades e institutos de doble dependencia (UNL-CONICET) en derechos de propiedad intelectual (https://www.unl.edu.ar/vinculacion/categorias/valorizacion-de-tecnologia). El mismo tiene por objetivo facilitar los procesos que permitan que el conocimiento generado en el ámbito de la UNL sea apropiado por el medio y contribuyan al desarrollo productivo y social. Asimismo, desde la oficina de vinculación tecnológica (OVT) del CCT-CONICET-SANTA FE (https://santafe.conicet.gov.ar/vinculacion/) brindan soporte al desarrollo y transferencia de tecnologías del CONICET para la promoción activa de la vinculación tecnológica. Ambos organismos, tienen una vasta experiencia para orientar y apoyar a grupos de investigación en el caso de que se necesite protección intelectual.



Además, la política de difusión de resultados y protección de los mismos será consultada con estos organismos previamente.