



Cafeína para descontaminar combustibles

Luz Marina Ocampo Carmona

Ingeniera química y Ph. D. en Ingeniería Metalúrgica y de Materiales
Directora del Grupo de Ciencia y Tecnología de Materiales de la
Universidad Nacional de Colombia - sede Medellín
lmocampo@unal.edu.co

Juan Fernando Espinal

Químico y Ph. D. en Ciencias Químicas
juan.espinal@udea.edu.co

Una alternativa para limpiar el azufre presente en el combustible líquido podría estar en compuestos promisorios en la descontaminación como la cafeína. El desarrollo de solventes basados en cafeína mostró que puede funcionar a menor temperatura, ser menos tóxicos y menos costosos que los procesos actuales de remoción de azufre.

Cada vez que un auto se enciende, se libera en la atmósfera dióxido de azufre proveniente de los combustibles fósiles.

Otros sectores industriales también emiten este gas que hace parte de los que se convierten en lluvia ácida cuando se mezcla con el agua atmosférica, lo que tiene impactos amplios en el ambiente: daños en cultivos, bosques y especies acuáticas, así como acidificación de los océanos; en la salud humana: enfermedades como el cáncer, el asma y otras enfermedades respiratorias y cardíacas; y en la industria: problemas de corrosión en las infraestructuras metálicas, además de afección del rendimiento y la eficiencia de los motores y la maquinaria.

Debido a lo anterior, varios gobiernos han fijado políticas de reducción del contenido de azufre en combustibles derivados del petróleo apuntando a límites cada vez más pequeños, una apuesta que se une a la gran preocupación por el desarrollo de energías alternativas a los hidrocarburos y combustibles derivados del petróleo.

El azufre: perjudicial en los combustibles líquidos

El azufre es un elemento abundante en la corteza terrestre. Es un componente natural de la

materia vegetal y animal. En su forma natural se puede encontrar en las cercanías a zonas volcánicas y aguas termales, donde se puede percibir olores desagradables provenientes de la presencia de este elemento. A partir de la materia vegetal y animal de la que se forma el petróleo crudo, teniendo en cuenta que este proceso ocurre bajo tierra, los elementos presentes en el material de partida estarán presentes en el crudo y sus derivados como la gasolina y el diésel.

Los hidrocarburos son compuestos formados principalmente por carbono e hidrógeno y pequeñas cantidades de azufre, nitrógeno y oxígeno, entre otros elementos. Luego de su extracción, el petróleo se lleva a una refinería (planta química industrial donde se procesa el petróleo) para obtener productos comercializables de mayor utilidad, como los combustibles líquidos, entre los que están la gasolina y el diésel. Pero, además, el azufre se usa en gran cantidad de procesos industriales como la producción de ácido sulfúrico para baterías, la fabricación de pólvora y la industria del caucho.

El método más utilizado para la eliminación de compuestos azufrados en los combustibles fósiles

La industria petrolera ha respondido con la hidrodesulfuración (HDS), uno de los métodos más utilizados, en el que el hidrógeno reacciona con los hidrocarburos conminados con azufre para eliminar el ácido sulfhídrico (H_2S) y obtener así combustibles con menos azufre. Pero este proceso requiere condiciones extremas: altas temperaturas, presiones elevadas, catalizadores de costos elevados y un consumo energético industrial de hidrógeno considerable. Además, el H_2S producido debe eliminarse porque inhibe las reacciones y destruye el catalizador. Este método, aunque efectivo, se aleja del enfoque de sostenibilidad que es cada vez más necesario en el escenario actual del consumo de combustibles fósiles.

Una alternativa en la cafeína

En la cafeína podría estar una parte de la solución. Investigadores de la Universidad Nacional de Colombia - sede Medellín y la Universidad de Antioquia han probado que con este compuesto se pueden desarrollar solventes verdes para remover azufre de los combustibles. La cafeína, presente en los granos de café y las hojas del té y del cacao, es un alcaloide considerado como la sustancia farmacológica ingerida con más frecuencia en el mundo debido a su uso para la elaboración de medicamentos para tratar el dolor de cabeza y como estimulante de venta libre.

Su estructura química es similar al imidazol, un compuesto químico ampliamente utilizado en medicamentos antimicóticos y usualmente empleado en procesos de desulfuración. La ventaja de usar la cafeína en dicho proceso es que puede reducir los costos en la reacción que, además, es menos tóxica y más biocompatible y sostenible.

Solventes naturales: una alternativa para la eliminación de compuestos azufrados

En los últimos años, el campo de la química verde o química sostenible ha ganado gran relevancia debido a la necesidad de desarrollar procesos industriales más sostenibles y respetuosos con el ambiente. Ésta se fundamenta en 12 principios.

Desde el año 2001 se ha buscado implementar el uso de solventes alternativos verdes para abordar los desafíos que enfrentan los métodos de HDS. Entre ellos están los líquidos iónicos (LIs) y los solventes eutécticos profundos (SEPs).

Los LIs tienen una estructura compuesta por un catión (ion con carga positiva) orgánico (sustancia que tiene como principal componente el carbono y hace parte de los seres vivos) y un anión (ion con carga negativa) inorgánico (sustancia que no tiene como componente al carbono, entre ellos los minerales) poliatómico. Los LIs basados en imidazol (compuestos orgánicos muy utilizados en medicamentos para el tratamiento de hongos) han mostrado una gran capacidad en los procesos de desulfuración de combustibles líquidos, pero presentan como desventajas su toxicidad y los altos costos de producción, lo que ha limitado su aplicación a escala industrial. Por su parte, los SEPs se pueden definir como una mezcla de dos o más sustancias químicas conocidas como aceptores y donantes de enlaces de hidrógeno que, al combinarse en una proporción particular, se vuelven líquidos a temperaturas menores a 100 °C.

Solventes basados en cafeína para la eliminación de compuestos azufrados presentes en los combustibles

Como una alternativa a los líquidos iónicos base imidazol, se exploró en la tesis de Maestría Síntesis de solventes alternativos (líquidos iónicos y solventes eutécticos profundos) base cafeína protonada con potencial aplicación para la desulfuración de combustibles, desarrollada en el Grupo de Ciencia y Tecnología de Materiales de la Universidad

Principios promovidos por la Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos (EPA, por su siglas en inglés).

Los 12 principios de la química verde

Para el diseño de productos y procesos químicos que reducen o eliminan el uso de sustancias peligrosas

-  **1 Prevenir** la creación de residuos
-  **2 Maximizar** la economía química
-  **3 Síntesis química** menos peligrosa
-  **4 Diseñar** productos y compuestos menos peligrosos
-  **5 Utilizar** disolventes y condiciones seguras de reacción
-  **6 Diseñar** para la eficiencia energética
-  **7 Utilizar** materias primas renovables
-  **8 Evitar** derivados químicos
-  **9 Utilizar** catalizadores
-  **10 Diseñar** productos fácilmente degradables
-  **11 Monitorear** los procesos químicos en tiempo real
-  **12 Prevenir** accidentes

Nacional de Colombia - sede Medellín, el uso de la cafeína en lugar de imidazol para desarrollar líquidos iónicos y solventes eutécticos profundos que permitieran la remoción de compuestos azufrados, ya que presentan estructuras químicas similares, además de que el costo de la cafeína es mucho menor que el imidazol.

Los LIs y SEPs basados en cafeína presentan como ventajas frente a los procesos de HDS el trabajar a temperaturas menores a 100 °C, una muy baja volatilidad, poca toxicidad (muchos de ellos se extraen de compuestos naturales, en este caso del café), biocompatibilidad, entre otras propiedades. Se destaca que la síntesis de los LIs y SEPs basados en cafeína ha sido poco investigada. Sus aplicaciones se han centrado en el campo de la catálisis y la electroquímica. Debido a lo anterior, el interés de la tesis fue evaluar una alternativa ambientalmente más sostenible en el campo de la extracción de compuestos azufrados como los LIs y SEPs base cafeína. La similitud

entre la estructura química del imidazol y la cafeína permite que la cafeína pueda ser utilizada para el desarrollo de compuestos más amigables con el ambiente que con el imidazol.

El proceso de síntesis

Primero, los investigadores modificaron cafeína mediante un proceso de protonación que consiste en añadir un ion H^+ para crear una sal llamada clorhidrato de cafeína (CafCl). Luego eligieron compuestos que, al reaccionar con esta sal de cafeína, tuvieran afinidad con los compuestos azufrados presentes en los combustibles.

En el caso del LI, se sintetizó el IL compuesto por $CafCl:FeCl_3 \cdot 6H_2O$ para confirmar la formación del anión tetracloroferrato ($FeCl_4^-$). De otro lado, se sintetizaron SEPs ternarios utilizando etilenglicol (EG) como donantes de enlaces de hidrógeno y CafCl y $ZnCl_2$ como aceptores de enlaces de hidrógeno, obteniendo dos SEPs ($ZnCl_2:EG:CafCl$). Se evaluó así la capacidad extractiva de los LIs y SEP en la desulfuración de un combustible al variar la temperatura, la relación LI/SEP y la cantidad de CafCl. El LI logró un porcentaje máximo de desulfuración de 12,9 %, mientras que el DES alcanzó un 17,44 %.

El desarrollo de solventes verdes basados en cafeína significó un gran reto para todo el equipo interdisciplinario de estudiantes, docentes y grupos de investigación. ✖

Este texto se deriva del proyecto «Desarrollo de líquidos iónicos a base de cafeína para la desulfuración de combustibles», financiado por el grupo de universidades que conforman el G8 y Ruta N, desarrollado por un equipo interdisciplinario de estudiantes, docentes y grupos de investigación: Ciencia y Tecnología de Materiales de la Universidad Nacional de Colombia, Química de Recursos Energéticos y Medio Ambiente de la Universidad de Antioquia y Materiales Avanzados y Energía de la Institución Universitaria ITM; entre los años 2022 y 2024.