

# CATALIZANDO LA INNOVACIÓN

## La historia que hay detrás del sistema Polyarc<sup>®</sup> - y cómo desencadenó el descubrimiento para hacer neumáticos de automóviles a partir de azúcar

Paul Dauenhauer es entrevistado por Charlotte Barker, junio 2017

### El Problema

Nuestro grupo tiene como objetivo producir productos químicos renovables a partir de biomasa, lo que implica el análisis de moléculas orgánicas complejas con una gran cantidad de heteroátomos (átomos que no son carbono o hidrógeno). Los heteroátomos cambian la relación de respuesta, por lo que GC-FID para estas moléculas requiere de una cuidadosa calibración. Para cada compuesto, hay que comprar un patrón (si está disponible - muchos no lo están) para definir el factor de respuesta - o utilizar una estimación aproximada. Necesitábamos encontrar un método mejor.

### Background

La primera conferencia de ingeniería química que asistí fue sobre el proceso “Haber”, que combina el nitrógeno del aire con el hidrógeno para producir amoníaco. Antes de su descubrimiento en 1904, el mundo se dirigía a la inanición masiva porque la agricultura no estaba a la altura del crecimiento demográfico. El fácil acceso a los fertilizantes a base de amoníaco nos dio los medios para cultivar suficiente comida para todos, pero también ha tenido serias consecuencias ambientales. Sin embargo, es una tecnología química que realmente ha cambiado el mundo. Me sentí inspirado.



INFORMACIÓN PUBLICADA EN [WWW.THEANALYTICALSCIENTIST.COM](http://WWW.THEANALYTICALSCIENTIST.COM)  
TRADUCIDA POR GALLPE-AC / DISTRIBUIDOR ARC EN ESPAÑA

---

Quise trabajar en un campo con el mismo potencial para cambiar el mundo y centré mi atención en los productos químicos renovables. Hay suficiente biomasa disponible, la economía tiene cada vez más sentido a medida que los precios de la glucosa caen y vi una oportunidad para salir adelante.

Mi grupo está compuesto de ingenieros, pero también somos químicos analíticos por necesidad; Los desafíos analíticos en la producción de energías renovables son inmensos. Uno de esos problemas es la dificultad de analizar los heteroátomos por GC-FID. Debido a que nuestras mezclas contienen un gran número de heteroátomos diferentes, puedes terminar con un cromatograma con cualquier cosa de 20 a 200 picos. El tiempo y el coste de toda esa calibración significó que sencillamente no era factible estudiar los cientos de compuestos que nos interesaban. En cambio, nos vimos obligados a trabajar con sistemas muy simples, seguidos de extrapolación. Pero como el factor de respuesta de estas moléculas heterogéneas puede variar de 0,01 a 1,2, al final las estimaciones ¡no son muy efectivas!

"Mi grupo está formado por ingenieros, pero también somos químicos analíticos por necesidad; Los desafíos analíticos en la producción de energías renovables son inmensos".

El problema con el detector FID cuando se trata de cuantificar es que su factor de respuesta depende de la estructura molecular. Un día estaba charlando con uno de mis estudiantes de posgrado sobre el problema, cuando llegamos a una solución. Se nos ocurrió que podríamos identificar y cuantificar los compuestos por separado. Para la cuantificación, sólo necesitamos averiguar la cantidad de carbono, ignorando la información estructural - y podríamos utilizar un método independiente, como la espectrometría de masas, para la identificación. Pensamos que, si convertimos todo a metano antes del FID, eliminaríamos el impacto de la estructura molecular en la cuantificación y terminaríamos con una respuesta lineal. Aunque era una idea muy simple, ponerla en práctica era un verdadero reto de ingeniería.





### Subida de Azúcar

Para nosotros, la tecnología detrás de Polyarc ha marcado una enorme diferencia en nuestro trabajo. De hecho, nos ayudó en el camino a un gran avance -el proceso para la fabricación de isopreno (componente principal de los neumáticos de automóviles) desde la glucosa, en lugar de petróleo.

Es un proceso en tres pasos:

- 1º. Glucosa > Ácido itacónico
- 2º. Ácido itacónico > 3-metil-tetrahidrofurano
- 3º. 3-metil-tetrahidrofurano > Isopreno

Los dos primeros pasos son bastante simples: el ácido itacónico ya está disponible comercialmente a partir de la fermentación con glucosa, y la hidrogenación secuencial produce 3-metil-tetrahidrofurano (3-MTHF).



INFORMACIÓN PUBLICADA EN [WWW.THEANALYTICALSCIENTIST.COM](http://WWW.THEANALYTICALSCIENTIST.COM)  
TRADUCIDA POR GALLPE-AC / DISTRIBUIDOR ARC EN ESPAÑA

---

La parte final (deshidra-deciclización de 3-MTHF) era el verdadero desafío. Primero, evaluamos todos los catalizadores convencionales - ninguno podría obtener más del 40 por ciento de selectividad. El descubrimiento se produjo cuando identificamos un nuevo catalizador con una selectividad del 90 por ciento. El isopreno resultante es idéntico al que se encuentra en los neumáticos de caucho sintético.

El sistema Polyarc mejoró mucho esta investigación de dos modos. En primer lugar, nuestros experimentos iniciales produjeron muchos productos secundarios, cada uno de los cuales se cuantificó fácilmente con el sistema Polyarc. En segundo lugar, nuestros experimentos se llevaron a cabo utilizando un sistema experimental de alto rendimiento que podría medir hasta 100 puntos de datos por día. El sistema Polyarc permitió el rastreo rápido y el análisis de un gran número de mezclas complejas para ayudarnos a determinar las condiciones con un 90 por ciento de rendimiento.

La capacidad de producir isopreno desde una fuente renovable trae muchos beneficios. Sabemos que hay una cantidad finita de petróleo, y como los suministros se agotan, los costos irán en aumento. Mediante el uso de hierba, maíz o madera para producir isopreno, esencialmente lo que hacemos es sacar el CO<sub>2</sub> del aire y meterlo en el producto - una forma de aislar el carbono. La producción nacional es otra gran ventaja. Soy de Minnesota, donde las dos grandes industrias son el maíz y la silvicultura. Ambas industrias están bajo presión y deseosas de encontrar usos nuevos y rentables para sus cultivos.

Nuestros detallados análisis tecno-económicos revelan que el factor coste más importante es la selectividad, por lo que estamos focalizando nuestros esfuerzos en impulsar que la selectividad sea tan alta como podamos. El proceso alcanza ahora un 90 por ciento de selectividad y seguimos trabajando en eso, mientras hablamos con varias compañías sobre la comercialización de la tecnología. Pasar a una escala industrial será un desafío, pero somos ingenieros, así que eso es nuestro pan y mantequilla.



## La Solución

Comenzamos con una mezcla de moléculas complejas y las pasamos a través de una columna GC. Después de que se haya producido la separación, en lugar de que la columna se alimente en el FID, cada molécula entra en un micro reactor que convierte cada molécula que contiene carbono en metano a través de reacciones dual de combustión seguida de reducción a metano. La segunda mitad de este proceso (CO<sub>2</sub> a metano) es similar a los metanizadores comerciales; Sin embargo, la etapa de combustión inicial significa que puede convertir todos los compuestos orgánicos en metano, mientras que un metanizador sólo puede convertir CO y CO<sub>2</sub>. El sistema puede usarse para reemplazar a los metanizadores existentes, pero tiene muchas más capacidades. La reacción puede representarse como:

Compuestos orgánicos + Aire + H<sub>2</sub> → Metano (CH<sub>4</sub>) + Subproductos no carbonosos

El metano entra en un detector FID convencional, donde la respuesta es proporcional a la cantidad de carbono. Ahora que todas las moléculas han sido convertidas en metano, la relación de respuesta es la misma de forma generalizada, por lo que no es necesario gastar mucho tiempo en la calibración. Los subproductos no carbonosos eluyen como compuestos volátiles. Por ejemplo, primero se oxida el azufre a dióxidos de azufre y luego se reduce a disulfuro de hidrógeno. Por esta razón, el cartucho catalizador Polyarc está diseñado para una vida útil larga, al tener en cuenta el impacto de la contaminación con el tiempo.

Conceptualmente, es muy simple - aunque hubo dos grandes retos en producir un sistema utilizable. Primero, tuvimos que identificar las condiciones termodinámicas que asegurarían una conversión de más del 99,9 por ciento a metano. Esto fue resuelto usando un cálculo termodinámico global de todas las estructuras moleculares posibles. En segundo lugar, necesitamos una conversión catalítica suficiente para abordar la conversión de equilibrio a metano. Para lograrlo combinamos el diseño del catalizador y del reactor para una actividad catalítica máxima. Hemos creado un prototipo – un feo monstruo Frankenstein de la máquina compuesta de un bloque de acero con orificios rectos conectados con tubería y accesorios. A pesar de los problemas con la mezcla y el largo tiempo de permanencia, el prototipo resultó muy útil en nuestro trabajo.



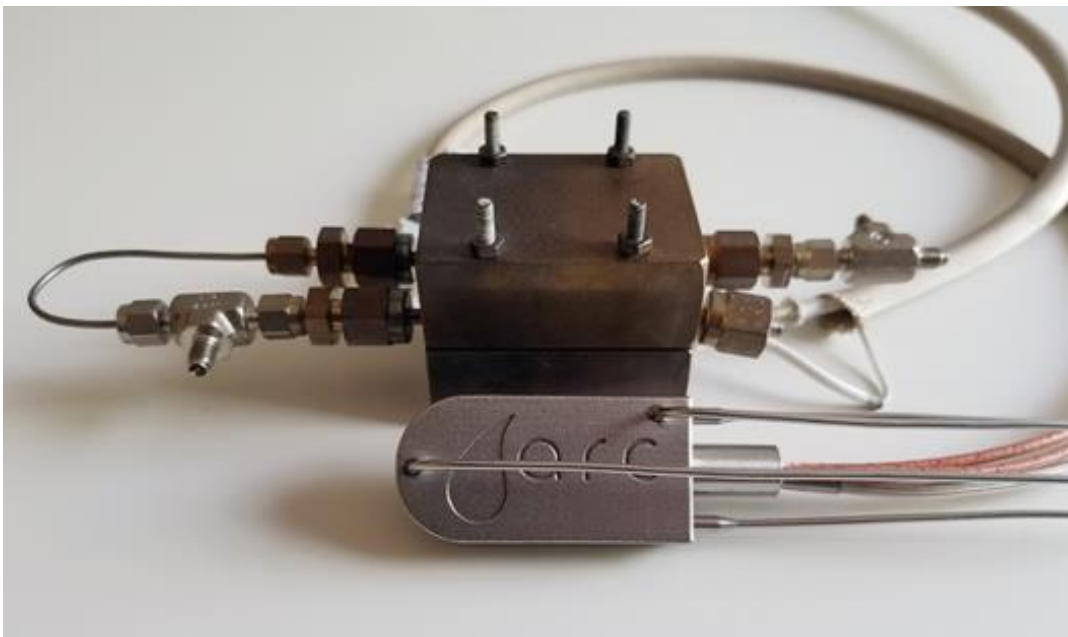
INFORMACIÓN PUBLICADA EN [WWW.THEANALYTICALSCIENTIST.COM](http://WWW.THEANALYTICALSCIENTIST.COM)  
TRADUCIDA POR GALLPE-AC / DISTRIBUIDOR ARC EN ESPAÑA

---

## El Polyarc: Aplicado

El sistema Polyarc ahora ha encontrado aplicaciones mucho más allá de su uso original para el análisis de energías renovables. Por ejemplo:

- Análisis de sabores y fragancias de compuestos donde los patrones comerciales no están disponibles o son prohibitivamente caros.
- Análisis de extraíbles y lixiviables utilizando espectrometría de masas y Polyarc/FID para agilizar el análisis y aumentar la precisión.
- Análisis forense de drogas sintéticas donde el añadir Polyarc ha permitido una cuantificación rápida además del análisis cualitativo existente.
- Análisis químico masivo y especiado de mezclas complejas para reducir los procedimientos de calibración, debido a que muchos de los compuestos de interés tienen puntos de ebullición por debajo de la temperatura ambiente.



El prototipo original (arriba) que eventualmente se convirtió en el Polyarc (abajo).



INFORMACIÓN PUBLICADA EN [WWW.THEANALYTICALSCIENTIST.COM](http://WWW.THEANALYTICALSCIENTIST.COM)  
TRADUCIDA POR GALLPE-AC / DISTRIBUIDOR ARC EN ESPAÑA

Conocí al director de la empresa Activated Research Company (ARC), Andrew Jones, hace alrededor de 10 años y cuando visitó mi laboratorio en 2014 nuestro "monstruo" llamó su atención. Después de explicarle cómo funcionaba, Andrew señaló que otros podrían encontrar nuestro enfoque muy útil. Pensamos ingenuamente que era sólo una solución relativamente simple a nuestro problema específico y por tanto no se nos había ocurrido que podría haber una historia de éxito comercial esperando revelarse.

En pocas palabras, ARC convirtió nuestro prototipo en un dispositivo elegante - el sistema Polyarc<sup>®</sup>. El principio es el mismo, pero ARC introdujo muchas mejoras; En particular, utilizando la impresión de metales 3D para producir el micro reactor – una primicia mundial. ARC también se enfocó en minimizar el volumen muerto en el micro reactor para asegurar que la cromatografía se mantuviera lo máximo posible y diseñó un sistema que puede integrarse fácilmente en cualquier configuración de GC. La eliminación del volumen muerto y la combinación con el micro reactor metálico impreso en 3D ayudan a mantener la resolución cromatográfica, manteniendo picos bonitos y agudos que son fáciles de integrar y cuantificar.

"No se nos había ocurrido que podría haber una historia de éxito comercial esperando revelarse".

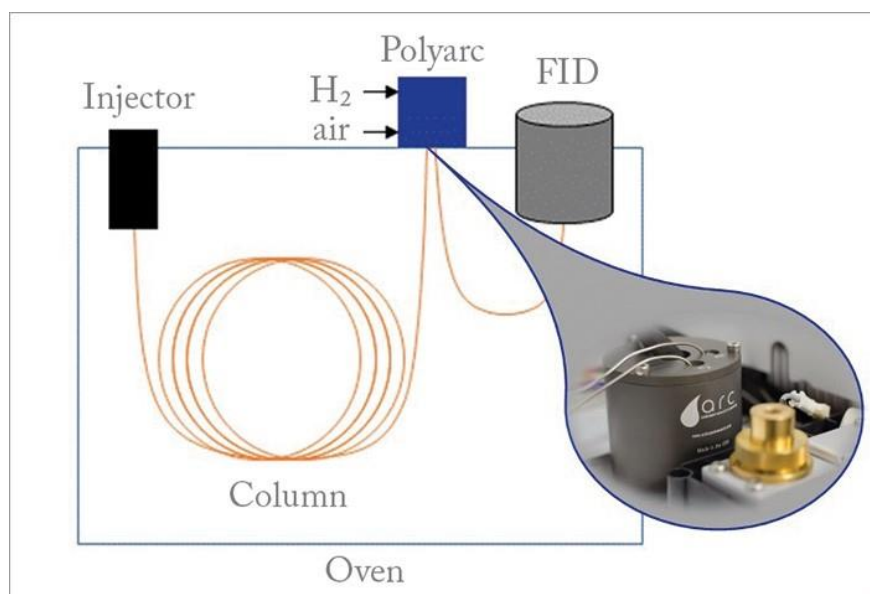


Figura 1. Cómo funciona el sistema Polyarc.

INFORMACIÓN PUBLICADA EN [WWW.THEANALYTICALSCIENTIST.COM](http://WWW.THEANALYTICALSCIENTIST.COM)  
TRADUCIDA POR GALLPE-AC / DISTRIBUIDOR ARC EN ESPAÑA

---

### Más allá de la solución

El sistema Polyarc está disponible comercialmente desde hace casi dos años, y regularmente recibo llamadas de personas que solicitan asesoramiento sobre aplicaciones u operación. La gente está encontrando nuevas aplicaciones que nunca había pensado. En un principio concebí la tecnología como un medio para analizar compuestos sin patrón de referencia, pero hay otros laboratorios que preferirían no almacenar patrones; Por ejemplo, laboratorios forenses que analizan drogas ilegales.

### Innovación galardonada

El sistema Polyarc fue reconocido en los Premios a la Innovación Científica Analítica 2015 (TASIAS), con el comentario de los jueces: "resuelve un problema tan antiguo como la GC."

Puede acceder al artículo original y sus referencias accediendo a este enlace: <http://bit.ly/2z9tBhj>





INFORMACIÓN PUBLICADA EN [WWW.THEANALYTICALSCIENTIST.COM](http://WWW.THEANALYTICALSCIENTIST.COM)  
TRADUCIDA POR GALLPE-AC / DISTRIBUIDOR ARC EN ESPAÑA

---

**PARA MÁS INFORMACIÓN, POR FAVOR CONTACTE CON NOSTROS**

**Teléfono: +34 91 849 90 18**  
**e mail: [info@gallpe.com](mailto:info@gallpe.com)**  
**Soporte: <https://soportegallpe.zendesk.com>**  
**web: [www.gallpe.com](http://www.gallpe.com)**

#### Redes Sociales

