

Hiili hyödyksi (C1 Value) -akatemiaohjelman hankkeet, rahoitus 6 M€, rahoituskausi 2020–2023

Hiilimonoksidin, metaanin ja metanolin tuotanto hiilidioksidin sähkökemiallisella pelkistyksellä

Miguel Caro, Aalto-yliopisto

Työssä hyödynnetään uusimpia käytettävissä olevia mallinnusmenetelmiä sopivan katalyytin löytämiseksi hiilidioksidin sähkökemialliseen pelkistykseen, jonka tuotteena syntyy hiilimonoksidia, metaania ja metanolia. Simulaatioissa yhdistetään koneoppimiseen perustuvia tekniikoita dielektrisen väliaineen mallintamiseksi elektrodin pinnan sekä reaktioaskelten kvanttimekaaniseen kuvaukseen. Simulaatioilla pyritään kartoittamaan lukuisia elektrokatalyyttivaihtoehtoja, kuten seostettuja nanopartikkeleita tai hiileen perustuvia materiaaleja, ja tunnistamaan lupaavimmat vaihtoehdot sekä tehokkaan konversion että selektiivisyyden kannalta.

Uusiutuva hiilikierto: hiilidioksidin muuntaminen polttoaineiksi räätälöityjen heterogeenisten katalyyttien avulla

Karoliina Honkala, Jyväskylän yliopisto

Riikka Puurunen, Aalto-yliopisto

Yksi tapa vähentää ilmakehän hiilidioksidipitoisuutta on talteenottaa se ja muuntaa arvokkaammiksi komponenteiksi, kuten polttoaineeksi tai kemianteollisuuden rakennusaineiksi. Hiilidioksidin laajamittainen teollinen käyttö edellyttää nykyistä aktiivisempien katalyyttien kehittämistä. COOLCAT on monitieteinen projekti, joka tutkii hiilidioksidin hydrausta kiinteillä katalyyteilla, joiden valmistus on atomitasolla tarkkaan määrätty ja toistettava. Projekti sisältää katalyyttien fysikaalis-kemiallista karakterisointia laskennallisesti ja kokeellisesti, reaktiomekasmittatutkimuksia sekä aktiivisuuskokeita. Tavoitteenamme on selvittää avainparameterit, jotka kontrolloivat aktiivisuutta, selektiivisyyttä ja stabiilisuutta, hyödyntäen atomitason ymmärrystä katalyytin rakenteesta, aktiivisista kohdista ja reaktiomekanismista. Projekti mahdollistaa katalyyttien rationaalisen suunnittelun ja niiden räätälöinnin hiilidioksidin hyödyntämiseen.

Hiilidioksidia sitovan asetaattiaktivoidun betonin mahdollistavat fysikaaliset mekanismit

Päivö Kinnunen, Oulun yliopisto

Sementti on maailman eniten tuotettu materiaali, ja sillä on suuri hiilijalanjälki (5–8%). Hydratoituihin magnesium karbonaateihin (HMC) perustuvat sementit ovat teoriassa hiilinegatiivisiä, joten ne voisivat mahdollistaa laajamittaisen hiilidioksidin talteenoton. Niiden käyttöä on hidastanut huono pitkäaikaiskestävyys, jota kuitenkin voitaisiin huomattavasti parantaa erilaisten ligandien, esim. asetaatin käytöllä. Niiden toiminnasta ei kuitenkaan ole vielä tarpeeksi tietoa. Niinpä CCC-projektissa selvitetään asetaattiligandin fysikaaliset toimintamekanismit HMC-sementtien mahdollistajina. Käytetyt menetelmät sisältävät laboratiokarakterisointeja kuten NMR ja hiukkaskiihdytinmittauksia, joita tukemaan tehdään tietokonemallinnuksia mahdollistaen nanomittakaavan toimintaperiaatteiden selvittämisen. Työ tehdään Oulun yliopistossa Kuitu- ja Partikkeliteknikan tutkimusyksikössä. Tulokset edistävät huomattavasti hiilidioksidia sitovan betonin kehittämistä kohti kaupallista sovellusta.

Hiilidioksidin ja metanolin bioelektrokemiallinen konversio pidempiketjuisiksi hiiliyhdisteiksi ja näiden talteenotto

Marika Kokko, Tampereen yliopisto

Ulla Lassi, Oulun yliopisto

Projektissa muunnetaan bakteerien avulla hiilidioksidia ja metanolia orgaanisiksi hapoiksi mikrobielektrosynteesillä. Projekti edistää kiertotaloutta sekä vähentää hiilidioksidin, kasvihuonekaasun, pääsyä ilmakehään. Projektin tavoitteena on kehittää ja karakterisoida innovatiivinen prosessi, jossa mikrobien avulla tuotetaan kemianteollisuuden raaka-aineita. Mikrobielektrosynteesin tuottonopeuksia ja saantoja kasvatetaan käyttämällä uusia hiilivahto elektrodeja sekä yhdistämällä prosessiin (puoli)jatkuva toiminta orgaanisten happojen talteenotto, jossa käytetään hyväksi räätälöityjä adsorbentteja. Monitieteinen projekti toteutetaan Tampereen yliopiston Tekniikan ja luonnontieteiden tiedekunnassa sekä Oulun yliopiston Teknillisessä tiedekunnassa.

C1 yhdisteiden konversio suoraan kaasufaasissa MOF katalyyttien avulla

Anna Lähde, Itä-Suomen yliopisto

Kari Rissanen, Jyväskylän yliopisto

Ilmaston muutoksen ja erityisesti kasvihuonekaasupäästöjen (C1 yhdisteet) hillitseminen ovat yksi ihmiskunnan suurimmista haasteista tänä päivänä. Tämän tutkimuksen tavoitteena on kehittää prosessi, joka mahdollistaa C1 yhdisteiden kuten CO₂ ja CH₄ suoran katalyyttisen muuntamisen hienokemikaaleiksi ja edelleen korkeamman käyttöasteen hiiliyhdisteiksi. C1 yhdisteiden muuntamisessa hyödynnetään jatkuvatoimista katalyyttistä kaasufaasisynteesiä.



Katalyyttinä käytetään metalli-orgaanisia häkkirakenteita (MOFs), jotka ovat osoittautuneet lupaaviksi C1 yhdisteiden kaasufaasireaktioissa verrattuna tavanomaisesti käytettyihin katalyytteihin. Perustavanlaatuisen tutkimus ja erityisesti MOF ominaisuuksien kehittäminen, kuten korkealämpötilastabiilisuus, kosteuden kestävyys sekä tehokas katalyyttinen aktiivisuus vähäisillä C1 kaasun osapaineilla on ollut vähäistä, vaikka ne ovat ensisijaisen tärkeitä kaupallistamisen kannalta.

Lisäarvoa CO₂ pohjaisille kemikaaleille C-C kytkennällä

Timo Repo, Helsingin yliopisto

Tässä projektissa tutkimme erityisesti uudenlaisia, kestävä kemian mukaisia reaktioreittejä hiili-hiili- sidoksen valmistamiseksi CO₂:n ja alkeenien (ja alkyynien) välille. Työssä hyödynnetään CO₂:n luontaisesti polarisoituneita C-O sidoksia C-CO₂ sidosten muodostamiseen. Tässä hankkeessa keskitytään kahteen katalyyttiseen aktivointireittiin, joista toinen perustuu Rh(I)hydrideihin ja niiden reaktiivisuuteen alkeenien ja CO₂:n kanssa, ja toiseen, joka perustuu alkeenien ja CO₂:n ainutlaatuisen vuorovaikutukseen turhautuneiden Lewis parien (FLP) kanssa. Lisäksi amiinien/CO₂:n välistä vuorovaikutusta tutkitaan yksityiskohtaisesti. Amiineilla on keskeinen rooli koko tutkimuksen kannalta sekä Rh(I), että FLP katalyyttien aktivoinnissa, mutta perustuen aikaisempaan havaintoomme, jotkut erityiset amiinit kykenevät jopa CO₂:n tehokkaaseen sieppaamiseen ilmasta.

ExtremoForm: Extremofila mikroorganismer som källa till effektiva enzymer för reducering av CO₂ till myrsyra och andra C1-bränslen och plattformskemikalier

Silvan Scheller, Aalto-yliopisto

Malin Bomberg, VTT OY

Jan Deska, Aalto-yliopisto

Nya bioapplikationer föreslår formiat eller myrsyra som förvaringsmolekyler för väte och råmaterial för kemikalier med högt mervärde som en lovande byggsten för vårt samhälle att bli fossiloberoende. Kemisk reduktion av CO₂ till formiat kräver dock dyra platinametaller. ExtremoForm-projektet är ett samarbete mellan Aalto-universitetet och VTT och syftar till att hitta nya köld- och syratålande enzymer från naturliga habitat. Dessa biokatalysatorer med överlägsen funktion under extrema förhållanden tillåter en hållbar produktion av myrsyra från CO₂ under kalla temperaturer. ExtremoForm kommer att uttrycka, rena och konstruera dessa enzymer för att utveckla kraftfulla biokatalytiska verktyg för CO₂-fixering som är oberoende av de mindre hållbara platinametallerna. Nya formiatdehydrogenaser ger också ett utmärkt tillfälle att expandera enzymernas produktportfölj även till andra CO₂-härledda plattformskemikalier eller lösningsmedel (t ex myrsyrans estrar och formamider).



Hiilidioksidin suora talteenotto ilmasta TPSA prosessilla, prosessin kokeellinen ja numeerinen mallinnus

Pekka Simell, VTT OY

Christian Breyer, Lappeenrannan-Lahden teknillinen yliopisto

Manu Lahtinen, Jyväskylän yliopisto

Ilmaston lämpenemisen ympäristövaikutukset näkyvät jo kaikkialla maapallolla. Hiilidioksidin kerääminen suoraan ilmasta DAC 2.0 projektin tarjoamalla teknologialla on yksi mahdollisista ratkaisuista tähän haasteeseen. Hankkeen tavoitteena on parantaa CO₂ talteenoton energiatehokkuutta alentamalla CO₂ talteenoton energiankulutus 4–6 kWh/kg CO₂. Tämä saavutetaan tehostamalla adsorptioprosessin lämpötilanhallintaa ja prosessiteknisillä ratkaisuilla. Projektissa tarkastellaan suoran hiilidioksidin talteenoton (DAC) soveltuvuutta ja kilpailukykyä verrattuna muihin hiilidioksidin talteenottotekniikoihin. Työssä yhdistyy poikkitieteellinen osaaminen sorbenttien ja metalliorganisten verkkorakenteiden kehittämisessä ja karakterisoinnissa sekä virtausmallinnuksessa. Tutkimustyössä käytetään apuna myös kuvankäsittelytekniikoita, elinkaarianalyysi- ja teknistaloudellisia tarkastelumenetelmiä.

Hiilidioksidin pelkistys katalyyttipinnoilla

Ilkka Tittoonen, Aalto-yliopisto

Ilmakehän kasvihuonekaasujen vähentäminen on ensisijaisen tärkeää, minkä vuoksi uusien menetelmien löytäminen hiilidioksidin katalysointiin harmittomammiksi kemikaaleiksi on keskeistä ympäristön palauttamiseksi. MQS-ryhmämme esittää uuden lähestymistavan CO₂-katalyyttien synteisiin, karakterisointiin ja mallintamiseen. Laaja-alainen kokeellinen tutkimus hiilidioksidin adsorptiosta metallisille, grafiittipohjaisille ja puolijohdekatalyyteille sekä uuden informaation hyödyntäminen adsorpoituneeseen CO₂-molekyylisiin kohdistuvien voimien mallintamiseksi mahdollistavat uusien katalyyttien ja katalyyttisten rakenteiden tunnistamisen. Kokeelliset tulokset uusista rakenteista puolestaan tukevat tarkempien teoreettisten mallien kehitystä. Kokeellisten tulosten ja simulaatioiden vuorovaikutus luo arvokkaan viitekehyksen tutkimukselle hiilidioksidin pelkistämiseksi ilmakehästä ja tarjoaa merkittävää tukea ilmaston CO₂-kasvun aiheuttamaa ilmastonlämpenemistä ja merien happamoitumista vastaan.