



Plan de Gestión de Datos

INFORMACIÓN SOBRE EL PROYECTO

1. – Datos del Proyecto

- Título del Proyecto (en castellano)

Desarrollo de nuevos catalizadores estructurados para reacciones de interés industrial y ambiental. Un enfoque multidisciplinario.

50620190100078LI

- Título del Proyecto (en inglés)

Development of new structured catalysts for reactions of both industrial and environmental interest. A multidisciplinary approach.

- Descripción del Proyecto (en castellano) Resumen

La actual población humana ha impulsado el desarrollo industrial hacia límites donde se hace indispensable buscar procesos que produzcan menor impacto ambiental y mayor eficiencia energética. Para esto se puede actuar, entre otros factores, en la eliminación de contaminantes de los efluentes industriales, tanto gaseosos como líquidos, y en el desarrollo de procesos que consuman menos recursos y contaminen menos, obteniendo productos de la misma calidad o aún mejor que con los procesos convencionales. En este proyecto estudiaremos la viabilidad de la síntesis de catalizadores estructurados utilizando insumos de fácil acceso en la región, especialmente biomateriales de desecho, con el auxilio de la impresión 3D como técnica aditiva, para el desarrollo de nuevas estructuras de diferentes materiales, con el objetivo de disminuir costos y sustituir importaciones. Las aplicaciones de estas estructuras se centrarán en parte en la eliminación de compuestos orgánicos volátiles (COVs) y partículas de hollín provenientes de fuentes móviles y estacionarias, siendo las industrias que utilizan solventes y las petroquímicas posibles destinatarias de los procesos a desarrollar. Otra aplicación es la eliminación de contaminantes de efluentes líquidos, eligiéndose en este proyecto a la oxidación húmeda de fenol con peróxido de hidrógeno como aplicación de los catalizadores sintetizados. En la rama del uso eficiente de la energía estudiaremos la reacción de deshidrogenación de etano para la obtención de etileno, el cual es una materia prima de gran demanda industrial por ser un bloque de construcción fundamental en la industria química y petroquímica. Una característica importante de este proyecto será el enfoque multidisciplinario, ya que en el grupo responsable confluyen las experiencias de investigadores en áreas de química, ingeniería, materiales y matemáticas, con la idea de diseñar nuevas estructuras a partir de modelos matemáticos que involucren los fenómenos de transporte y la cinética de las reacciones conjuntamente con el desarrollo de nuevos materiales.

- Descripción del Proyecto (en inglés) Resumen

The current human population has pushed industrial development towards limits where it is essential to seek for processes that produce less environmental impact and greater energy efficiency. For this, it is possible to act, among other factors, in the elimination of pollutants from industrial effluents, both gaseous and liquid, and in the development of processes that consume less resources and pollution, obtaining products of the same quality or even better than achieved with standard processes. In this project we study the feasibility of the synthesis of structured catalysts using materials easily accessible in the region, especially waste biomaterials, with the help of 3D printing as an additive technique. The development of new structures of different materials will help to decrease costs and replace imports. The applications of these structures will focus in part on the elimination of volatile organic compounds (VOCs) and soot particles from mobile and stationary sources, with industries that use solvents and petrochemicals being the target of the processes under study. Another application is the removal of pollutants from liquid effluents, choosing in this project the wet oxidation of phenol with hydrogen peroxide as the application of the synthesized catalysts. In the line of efficient use of energy, we will study the reaction of ethane dehydrogenation to obtain ethylene, which is a raw material of great industrial demand as it is a fundamental building block in the chemical and petrochemical industry. An important characteristic of this project will be the multidisciplinary approach, since the experiences of researchers in the areas of chemistry, engineering, materials and mathematics come together in the group responsible, with the idea of designing new structures, starting from mathematical models that involve transport phenomena and reaction kinetics, together with the development of new materials.

- Palabras Claves descriptivas del Proyecto (en castellano)

Catalizadores Estructurados

Impresión 3D

Procesos industriales



- Palabras Claves descriptivas del Proyecto (en inglés)		
Structured Catalysts	3D Print	Industrial processes
2 – Datos del Director del Proyecto		
- Nombre y Apellido		
Eduardo Ernesto Miró		
- Unidad Académica		
Facultad de Ingeniería Química		
- Teléfono oficial de contacto		
342-4536861, interno: 25		
-Teléfono móvil de contacto		
-E-mail del Director del Proyecto		
emiro@fiq.unl.edu.ar		

DATOS RESULTANTES DE LA EJECUCIÓN DEL PROYECTO

-Describe la toma de muestras / datos a realizar

Dadas las características del proyecto, las muestras/datos a adquirir y analizar se refieren a cuatro etapas:

- Preparación de catalizadores estructurados y caracterización fisicoquímica
- Evaluación catalítica en las reacciones seleccionadas
- Modelado matemático del proceso catalítico

Durante el proceso de preparación de catalizadores los datos típicos serán la carga de fase activa, resistencia de las estructuras y otras propiedades físicas como porosidad, superficie específica y estructura cristalina. A su vez, mediante técnicas espectroscópicas se evaluará la composición química superficial y las propiedades fisicoquímicas tales como la detección de especies catalíticamente activas y la distribución de las mismas en la superficie y en el bulk.

Durante los ensayos de desempeño de los catalizadores éstos se evaluarán los en las reacciones de eliminación de diferentes compuestos contaminantes presentes en corrientes gaseosas o líquidas. En ambos casos se usarán métodos analíticos:

Reacciones en fase líquida. Por medidas colorimétricas se determinan las concentraciones de reactivos y productos. Se obtienen muestras a diferentes tiempos, de modo de calcular conversión en función del tiempo a temperatura constante en un reactor batch. También para la medición de la selectividad, por medidas de carbono orgánico total es posible determinar la cantidad del contaminante orgánico que se ha convertido en CO₂ y en productos secundarios. Por medio de cromatografía de líquida de alta presión (HPLC) se determinará y cuantificará los compuestos intermediarios presentes durante la eliminación del fenol.

Reacciones en fase gas. Para determinar las concentraciones de reactivos, intermediarios y productos de las reacciones en estudio se utilizará cromatografía en fase gas

A partir de las evaluaciones catalíticas, se determinarán los parámetros cinéticos de las reacciones: constantes cinéticas, órdenes de reacción y energías de activación. Estos datos se utilizarán para, en combinación con las ecuaciones características de los fenómenos de transporte de masa y calor, desarrollar un modelo matemático de los procesos que permita realizar simulaciones, de modo de optimizar las estructuras que serán soporte de las sustancias activas para las distintas reacciones.

Dadas las características del proyecto, las muestras/datos a adquirir y analizar se refieren a cuatro etapas:

- Preparación de catalizadores estructurados y caracterización fisicoquímica
- Evaluación catalítica en las reacciones seleccionadas
- Modelado matemático del proceso catalítico

Durante el proceso de preparación de catalizadores los datos típicos serán la carga de fase activa, resistencia de las estructuras y otras propiedades físicas como porosidad, superficie específica y estructura cristalina. A su vez, mediante técnicas espectroscópicas se evaluará la composición química superficial y las propiedades fisicoquímicas tales como la detección de especies catalíticamente activas y la distribución de las mismas en la superficie y en el



bulk.

Durante los ensayos de desempeño de los catalizadores éstos se evaluarán los en las reacciones de eliminación de diferentes compuestos contaminantes presentes en corrientes gaseosas o líquidas. En ambos casos se usarán métodos analíticos:

Reacciones en fase líquida. Por medidas colorimétricas se determinan las concentraciones de reactivos y productos. Se obtienen muestras a diferentes tiempos, de modo de calcular conversión en función del tiempo a temperatura constante en un reactor batch. También para la medición de la selectividad, por medidas de carbono orgánico total es posible determinar la cantidad del contaminante orgánico que se ha convertido en CO₂ y en productos secundarios. Por medio de cromatografía de líquida de alta presión (HPLC) se determinará y cuantificará los compuestos intermediarios presentes durante la eliminación del fenol.

Reacciones en fase gas. Para determinar las concentraciones de reactivos, intermediarios y productos de las reacciones en estudio se utilizará cromatografía en fase gas

A partir de las evaluaciones catalíticas, se determinarán los parámetros cinéticos de las reacciones: constantes cinéticas, órdenes de reacción y energías de activación. Estos datos se utilizarán para, en combinación con las ecuaciones características de los fenómenos de transporte de masa y calor, desarrollar un modelo matemático de los procesos que permita realizar simulaciones, de modo de optimizar las estructuras que serán soporte de las sustancias activas para las distintas reacciones.

– 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)

X	NO
SI. Elija una de las opciones:	
a)	Se encuentra en evaluación de protección por medio de patentes
b)	No se inició el proceso de evaluación de patentabilidad, pero podría ser protegible
c)	Existe un contrato con un tercero que impide la divulgación
d)	Otro. Justifique.

– Período de Confidencialidad: Es el período durante el cual los datos no deberían ser publicados, contado a partir del momento de la toma de los mismos. El período 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
5 (CINCO) años
Otro.
Motivos:

Eduardo Ernesto Miró, Santa Fe 20 de Abril de 2020