

Anexo II

Plan de Gestión de Datos (Código: 85520240100010LI).

INFORMACIÓN SOBRE EL PROYECTO
1. – Título del Proyecto
- Título del Proyecto (en castellano)
Calentamiento por efecto Joule o inductivo para el mejoramiento del desempeño de catalizadores estructurados metálicos en reacciones de oxidación (Código: 85520240100010LI).
- Título del Proyecto (en inglés)
Heating by the Joule or inductive effects for the performance enhancement of metal structured catalysts in oxidation reactions.
-Descripción del Proyecto (en castellano) Resumen
<p>Los catalizadores estructurados tomaron gran relevancia en el último tiempo debido a que por su estructura geométrica permiten el tratamiento de grandes volúmenes de gases. Particularmente esto resulta útil para el tratamiento de gases de escape de motores o de procesos industriales o en la industria petroquímica que por lo general opera con grandes volúmenes de reactivos gaseosos.</p> <p>Buscando optimizar el consumo de energía se estudiarán dos métodos de calentamiento que poseen varias ventajas, ya que el calentamiento resulta más específico focalizándose sólo en el catalizador y no en todo el reactor.</p> <p>Para lograr esto se establecen los siguientes puntos en el proyecto:</p> <ul style="list-style-type: none">• Sintetizar catalizadores estructurados por medio de la Deposición de Capa Atómica (ALD).• Obtener los parámetros para la deposición de Ni y Co por medio de la técnica ALD.• Diseñar y construir los sistemas para calentar los catalizadores metálicos estructurados mediante efecto Joule o por inducción.• Evaluar su desempeño en reacciones test como la oxidación de CO y de hollín y en la deshidrogenación oxidativa de etano para obtener etileno, calefaccionando los catalizadores por técnicas no convencionales.• Comparar el desempeño de los sistemas con métodos de calentamiento tradicionales. <p>Sobre los sustratos metálicos se depositará una capa de Al_2O_3, ZrO_2 o $Al_2O_3-ZrO_2$ por el método de washcoating para luego incorporar los metales activos del catalizador. La técnica elegida para la deposición de los elementos activos del catalizador es la de deposición por capa atómica, la cual permite depositar capas de catalizador bien dispersas sobre el sustrato.</p> <p>Las reacciones elegidas revisten importancia ambiental e industrial. Específicamente, el CO y el hollín con compuestos que están presentes en los gases de combustión de los motores diésel que están ampliamente difundidos por su fortaleza y durabilidad. Por lo que su eliminación de los gases de escape es importante para disminuir su impacto en el ambiente.</p> <p>El etileno es un compuesto muy importante en la industria química ya que es el principal reactivo de muchos procesos industriales que generan productos que consumimos a diario. La deshidrogenación oxidativa de etano se produce a temperaturas moderadas y genera menos emisiones en comparación con el método tradicional, craqueo con vapor de agua.</p> <p>El proyecto prevé la implementación de dos métodos de calentamiento directo de catalizadores (efecto Joule o inducción) además del calentamiento convencional, buscando optimizar el gasto energético global y aumentar el rendimiento de los catalizadores.</p>

-Descripción del Proyecto (en inglés) Resumen
<p>Structured catalysts have recently become important because their geometrical structure allows the treatment of large volumes of gases. This is particularly useful for the treatment of exhaust gases from engines, industrial processes and in the petrochemical industry, which generally operates with large volumes of gaseous reagents.</p> <p>In order to optimize the energy consumption two heating methods that have several advantages will be studied, since the heating is more specific, focused only on the catalyst and not on the reactor. To achieve this aim in the project, the following points are established:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Synthesize structured catalysts by Atomic Layer Deposition (ALD). - To obtain parameters for the deposition of Ni and Co through the ALD technique. - Design and build systems to heat the structured metal catalysts by the Joule effect or by induction. - Evaluate their performance in test reactions such as CO and soot oxidation and in the oxidative dehydrogenation of ethane to obtain ethylene, heating the catalysts by non-conventional techniques. - To compare the performance of the systems with traditional heating methods. <p>A layer of Al₂O₃, ZrO₂ or Al₂O₃-ZrO₂ will be deposited on the metal substrates by the washcoating method to subsequently incorporate the active metals of the catalyst. The technique chosen for the deposition of the catalyst active elements is the Atomic Layer Deposition, which allows the deposition of well dispersed catalyst layers on the substrate.</p> <p>The reactions chosen are of environmental and industrial importance. Specifically, CO and soot are present in diesel engine exhaust, that are widely spread for their strength and durability. Therefore, their elimination from exhaust gases is important to reduce their impact on the environment.</p> <p>Ethylene is a very important compound in the chemical industry as it is the main reagent in many industrial processes that generate products that we consume every day. The oxidative dehydrogenation of ethane is produced at moderate temperatures and generates lower emissions compared to the steam cracking.</p> <p>The project foresees the implementation of two methods of direct heating of catalysts (Joule effect or induction) in addition to conventional heating, in order to optimize the overall energy expenditure and increase the performance of the catalysts.</p>
-Palabras Clave descriptivas del Proyecto (en castellano)
Joule, inducción, monóxido de carbono, etileno, hollín.
- Palabras Clave descriptivas del Proyecto (en inglés)
Joule, induction, carbon monoxide, ethylene, soot.
2 – Datos del director del proyecto
- Nombre y Apellido
Ezequiel David Banús
- Unidad Académica
Facultad de Ingeniería Química
- Teléfono oficial de contacto
-
-Teléfono móvil de contacto
342-4070170
-E-mail del director del proyecto
edbanus@fiq.unl.edu.ar

DATOS RESULTANTES DE LA EJECUCIÓN DEL PROYECTO

-Describa la toma de muestras / datos a realizar

Dadas las características del proyecto, las muestras/datos a adquirir y analizar se refieren a tres etapas. Es necesario mencionar que todo lo realizado será a escala de laboratorio.

- Preparación de catalizadores estructurados y caracterización fisicoquímica de los mismos.
- Evaluación catalítica en las reacciones seleccionadas.
- Comparación de los desempeños catalíticos de los diferentes reacciones, catalizadores y métodos de calentamiento.

Preparación de los catalizadores estructurados.

Esta etapa será común para todos los catalizadores, independientemente de la reacción en la cual se empleará. No obstante, el componente activo del catalizador será función de la aplicación, siendo cobalto para la oxidación de CO y hollín y níquel para la deshidrogenación oxidativa de etano.

Antes de comenzar con la preparación de los catalizadores, se requiere una etapa de adecuación de los sustratos estructurados que puede consistir en un tratamiento a alta temperatura durante lapsos de tiempos variables.

Durante el proceso de preparación los datos típicos serán la carga superficial del soporte sobre el sustrato estructurado acondicionado. En cuanto a la fase activa no será posible determinar su cantidad mediante pesada directa debido a que la técnica utilizada para su deposición incorpora poca cantidad. Por ello, se requiere caracterizar el catalizador a través de alguna técnica como Fluorescencia de Rayos X.

Caracterización de los catalizadores estructurados.

Esta etapa será similar para todos los catalizadores, independientemente a la reacción en la cual se emplearán. En lo referido a la resistencia de las estructuras se medirá de dos maneras: (i) mecánica, utilizando solventes orgánicos y ultrasonido y (ii) choque térmico, debido a que los procesos de calentamiento por inducción y efecto joule producen calentamientos cercanos a 200°C/minuto. Se determinarán 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 presencia de especies catalíticamente activas y su distribución en la superficie y en el *bulk*, con técnicas como XPS, DRX y FRX.

Evaluaciones catalíticas.

En equipos de flujo ya montados y en funcionamientos se cuenta con cromatógrafos gaseosos Shimadzu GC2014, con detectores de conductividad térmica (TCD) y de ionización de llama (FID), de donde se obtendrán cromatogramas que informarán la composición molar de la entrada y salida de los reactores.

Oxidación de CO y hollín.

Para la combustión de hollín y la oxidación de CO los datos a obtener son de conversión como función de la temperatura, siendo el CO₂ el único producto de la reacción.

Los catalizadores se cargan con hollín por medio de la inmersión de los mismos en una suspensión en diferentes solventes orgánicos. La cantidad de hollín cargado se determina por la cantidad de CO₂ generado al 100% de conversión ya que no puede ser determinado por pesada. Para saber este factor de conversión se trabaja con mezcla de catalizadores en polvo y hollín, donde se puede saber exactamente la cantidad de hollín agregada y con la cantidad de CO₂ generado se obtiene este factor de conversión. Para el CO, se determina la

composición inicial con los diferentes caudales de gases.

Deshidrogenación oxidativa del etano

Para la obtención de etileno se obtiene la conversión de etano y además la selectividad a etileno, tanto en función de la temperatura como de la conversión. La obtención de la selectividad es de importancia ya que el etano puede convertirse en etileno o en CO₂ y H₂O. La composición de la alimentación se ajustará con los caudales de alimentación y se confirmará por medio de análisis cromatográfico. A la salida del reactor habrá una trampa de agua que es un producto de la reacción. En este caso y para poder comparar con estudios previos, se fijará una relación W/F acorde. Esta relación corresponde al cociente entre la masa de catalizador (W) y el flujo de reactivos (F).

Estudios de los resultados catalíticos.

Los datos de conversión y de selectividad/conversión serán analizados para evaluar el efecto que tiene el método de calentamiento en el desempeño de los diferentes catalizadores estructurados. Se espera que los desempeños de los catalizadores calentando por métodos no tradicionales sean mejores que aquellos comparados con los métodos tradicionales.

– 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:
	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
	5 (CINCO) años
	Otro.
	Motivos: