

## Catalizadores de carbono con configuración tipo válvula Tesla obtenidos a partir de impresión 3D: alcance del diseño en el comportamiento fluidodinámico y actividad catalítica

A. Parra-Marfil<sup>1,2</sup>, E. Bailón-García<sup>1</sup>, R. Ocampo-Pérez<sup>2</sup>, F. Carrasco-Marín<sup>1</sup>, A.F. Pérez-Cadenas<sup>1</sup>, A. Bueno-López<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Materiales Polifuncionales Basados en Carbono (UGR-Carbon), Dpto. Química Inorgánica - Unidad de Excelencia Química Aplicada a Biomedicina y Medioambiente - Universidad de Granada (UEQ-UGR), ES 18071-Granada, España.

<sup>2</sup>Centro de Investigación y Estudios de Posgrado, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, MX 78210-San Luis Potosí, México.

<sup>3</sup>Dpto. de Química Inorgánica, Universidad de Alicante, ES 03080-Alicante, España

adrianaparra@correo.ugr.es

Palabras clave: impresión 3D, válvula tesla, aerodinámica, metanación de CO<sub>2</sub>.

### Introducción

Las propiedades fluidodinámicas de los monolitos tipo honeycomb representan una gran ventaja respecto a sistemas empaquetados a nivel industrial, proporcionando mayor eficiencia y menor caída de presión al tratar flujos elevados. No obstante, su fabricación generalmente se realiza mediante extrusión, por lo que su diseño está limitado a canales rectos y paralelos. La impresión 3D como herramienta en la preparación de soportes ha posibilitado obtener catalizadores con diferentes composiciones y conformaciones que no se pueden obtener con técnicas convencionales. El diseño avanzado de catalizadores permite optimizar su desempeño en términos de estabilidad y actividad. Por lo tanto, en este trabajo se aprovechó la impresión 3D junto con el proceso sol-gel para la obtención de monolitos de carbono con canales complejos que generen turbulencia y mejoren la interacción fluido-catalizador. Se estudió el efecto del diseño en el comportamiento fluidodinámico y en la actividad catalítica en la metanación de CO<sub>2</sub> mediante la comparación de materiales con canales tipo válvula tesla y tipo válvula tesla con una modificación para mejorar su eficiencia.

### Metodología experimental

Mediante impresión 3D se obtuvieron moldes poliméricos usados como negativo de los canales deseados -canales tipo válvula tesla (T) y válvula tesla modificado (Tm)-. Los moldes se introdujeron en tubos de vidrio, se llenaron con una solución de resorcinol, formaldehído y agua, se sellaron y se realizó un proceso de polimerización controlado, obteniendo así monolitos orgánicos. Dichos monolitos orgánicos se carbonizaron en atmosfera inerte a 850 °C durante 2 horas. Con el incremento de la temperatura, el molde de polímero termofusible se funde dejando libre el canal con la geometría deseada.

Se usó Ni/CeO<sub>2</sub> como fase activa, la cual se depositó en los monolitos mediante inmersión en una suspensión etanólica (10 wt%). La actividad catalítica en la reacción de metanación de CO<sub>2</sub>, (10% CO<sub>2</sub>, 40% H<sub>2</sub> en Ar) se estudió a presión atmosférica, previa reducción de la fase activa (H<sub>2</sub>/Ar a 500 °C) en un reactor cilíndrico horizontal con control de temperatura y flujos entre 100 y 500 mL/min. Se evaluó la actividad de los catalizadores mediante la conversión de CO<sub>2</sub> (CCO<sub>2</sub>) y la velocidad de reacción obtenida. Además, se realizó la simulación fluidodinámica de los canales de ambos diseños mediante el software COMSOL Multiphysics.

### Resultados y discusión

De acuerdo con resultados previos de la caracterización de la fase activa, tanto en polvo como soportada, se verificó que el proceso de recubrimiento y su interacción con la estructura carbonosa no altera las propiedades del Ni/CeO<sub>2</sub>, por tanto, los resultados del desempeño catalítico se han atribuido a los cambios en el diseño del monolito. La difusión de la suspensión de Ni/CeO<sub>2</sub> durante la impregnación se facilitó gracias a la macroporosidad de los materiales, obteniendo una distribución homogénea de la fase activa en la matriz carbonosa. En cuanto a la evaluación catalítica se calcularon las CCO<sub>2</sub> y velocidades de reacción obtenidas para ambos diseños, cuyos resultados se presentan en la Figura 1. La Figura 1a muestra una ligera diferencia en la CCO<sub>2</sub> obtenida tratando un flujo de 400 mL/min con ambos materiales, principalmente entre 260 y 300 °C donde se observa un incremento en la conversión para el diseño Tm. No obstante, el efecto del diseño se hace más evidente al comparar las velocidades de reacción alcanzadas en ambos catalizadores. La Figura 1b muestra que la modificación incrementa hasta 24 % la velocidad de reacción independientemente del caudal tratado. Por otra parte, respecto al estudio fluidodinámico la simulación realizada mediante el programa COMSOL Multiphysics corroboró que la modificación en el diseño incrementó ~80 % la velocidad promedio con la que fluyen los gases a lo largo del canal Tm (0.72 cm/s para Tm vs 0.4 cm/s para T). Además, los perfiles de velocidad del flujo confirmaron que la modificación del diseño generó mayores zonas de máxima velocidad del fluido, lo que ayuda al gas a difundirse a través de la red de carbono mejorando el contacto y la accesibilidad de los reactivos a la fase activa (Figura 1c).

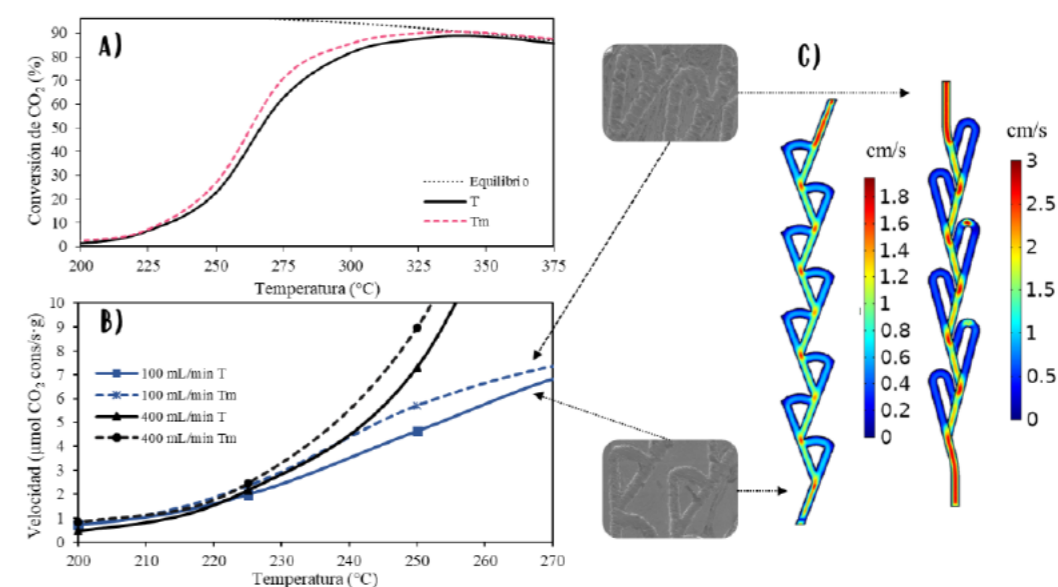


Figura 1. Efecto de la modificación del diseño de canal en la actividad catalítica. a) conversión de CO<sub>2</sub> (400 mL/min); b) velocidad de reacción; y c) análisis aerodinámico.

### Conclusiones

La innovación en el desarrollo de materiales con la versatilidad de diseño de la impresión 3D, aunado al proceso sol-gel, permitió la producción de monolitos de carbono con configuración avanzada no realizable con métodos tradicionales. Las pruebas de metanación de CO<sub>2</sub> confirmaron el efecto del diseño en la aerodinámica y, como consecuencia, en la actividad catalítica de los monolitos. Este trabajo demuestra la capacidad de la impresión 3D para superar las limitaciones actuales en la producción de materiales con geometría compleja que ofrezcan mayor eficiencia en procesos catalíticos.

### Agradecimientos

Los autores agradecen el apoyo financiero a MCIN/AEI/ 10.13039/501100011033/, "FEDER Una manera de hacer Europa" el proyecto PID2021-127803OB-I00, y a CONACyT, México a través de la BECA 818974.