

PRODUCCIÓN DE HIDRÓGENO VERDE EN UN REACTOR POROSO DE WATER-SPLITTING

GREEN HYDROGEN PRODUCTION IN A POROUS WATER-SPLITTING REACTOR

Paula S. Rojas y Mario G. Toledo

*Grupo de Termoquímica Sostenible, Universidad Técnica Federico Santa María, Av. España 1680,
Valparaíso, Chile, mario.toledo@usm.cl, https://gts.usm.cl*

Palabras clave: Modelación computacional, water-splitting, ciclos termoquímicos, medios porosos, hidrógeno verde, energía solar.

Resumen.

En Chile se está desarrollando un proceso de descarbonización, donde se busca aprovechar el potencial de las energías renovables para la producción de hidrógeno verde (H_2v). Los ciclos termoquímicos de water-splitting (WS) utilizando óxido de cerio (ceria) han sido ampliamente estudiados para estos fines. Se propone un modelo matemático 1D para investigar el proceso de producción de H_2v mediante un reactor idealizado de WS. Las ecuaciones que rigen el modelo, como son la conservación de masa, energía y variación de concentración de vacancias, se resuelven mediante diferencias finitas, usando el Algoritmo de Thomas en un código in-house escrito en Fortran. Datos de la literatura respaldan las cinéticas de reacción. Resultados obtenidos muestran producciones de H_2v de hasta 2000 micro-mol/g de ceria, con temperaturas máximas de 1100 K en reducción y 450-850 K en oxidación. El modelo matemático permitió reconocer parámetros que mejoran la producción de hidrógeno: (a) incrementar el aporte de concentración solar, permitir una mayor duración de la etapa, y aumentar la velocidad de entrada del nitrógeno, en la etapa de reducción; y (b) permitir una mayor duración de la etapa de oxidación.

Keywords: Computational modeling, water-splitting, thermochemical cycling, porous media, green hydrogen, solar energy.

Abstract. In Chile, a decarbonization process is being developed to take advantage of the potential of renewable energies for the production of green hydrogen (H_2v). Thermochemical water-splitting (WS) cycles using cerium oxide (ceria) have been extensively studied for these purposes. A 1D mathematical model is proposed to investigate the H_2v production process using an idealized WS reactor. The equations governing the model, such as conservation of mass, energy and vacancy concentration variation, are solved by finite difference using the Thomas Algorithm in an in-house code written in Fortran. Literature data support the reaction kinetics. Results obtained show H_2v yields up to 2000 micro-mol/g ceria, with maximum temperatures of 1100 K in reduction and 450-850 K in oxidation. The mathematical model allowed to recognize parameters that improve hydrogen production: (a) to increase the solar concentration contribution, to allow a longer duration of the stage, and to increase the nitrogen input rate, in the reduction stage; and (b) to allow a longer duration of the oxidation stage.

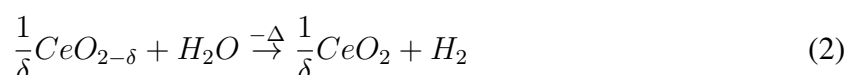
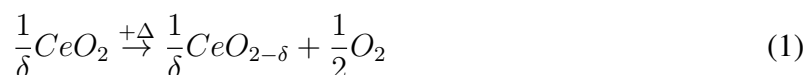
1. INTRODUCCIÓN

En los últimos tiempos, la protección del medio ambiente se ha vuelto una responsabilidad ineludible a nivel global (Fragiacomo y Genovece, 2019). En este escenario, el hidrógeno (H_2) ha surgido como un vector energético y combustible altamente prometedor debido a su capacidad para almacenar, transportar y aprovechar energía renovable en diversos sectores, contribuyendo así a reducir las emisiones contaminantes (Dawood, 2020; Oliveira, 2021; Mehrpooya y Habibi, 2020). Este recurso energético posee un excepcional poder calorífico de 141,9 MJ/kg, superando a los combustibles convencionales. Además, al ser combustionado se disminuyen de manera importante las emisiones de contaminantes, y no se generan CO_2 (Gager, 2022; Bhosale y AlMamani, 2020).

Chile posee condiciones geográficas ideales para la generación de hidrógeno mediante fuentes renovables por sus altos niveles de radiación solar en el norte y vientos fuertes en el sur, lo que propicia la obtención de H_2 a un costo competitivo a nivel mundial. El país ha impulsado incentivos y objetivos enfocados en la producción de hidrógeno verde, aspirando a lograr neutralidad de carbono para el año 2050, según lo expuesto en la Estrategia de Descarbonización Nacional (Ministerio de Energía).

Hasta el año 2019, aproximadamente el 96 % de la producción de hidrógeno involucraba métodos convencionales que resultaban en emisiones de CO_2 asociadas a los procesos y a la materia prima utilizada (Safari y Dincer, 2020; production via two-step water splitting thermochemical cycle based on metal oxide A review., 2020). Se han investigado diversos enfoques para obtener hidrógeno, siendo particularmente atractivos aquellos que permiten generar hidrógeno verde. Uno de los métodos destacados es la electrólisis utilizando fuentes renovables (Fragiacomo y Genovece, 2019; Safari y Dincer, 2020; Ishaq, 2022). Otra opción promisoría la constituyen los ciclos termoquímicos, en los cuales la descomposición del agua ocurre a temperaturas más moderadas en comparación con la termólisis directa, generando la posibilidad de producir hidrógeno verde mediante concentración solar (Fragiacomo y Genovece, 2019; Arifin, 2018; Haeussler, 2020). Estos enfoques son especialmente adecuados para su implementación en Chile.

Diferentes óxidos metálicos han sido investigados para llevar a cabo estos ciclos termoquímicos, y la ceria (CeO_2) se erige como una opción sólida. Las reacciones de reducción y oxidación en el ciclo termoquímico utilizando ceria se describen mediante las Ecuaciones 1 y 2 respectivamente (Arifin, 2018; Haeussler, 2020; Bulfin, 2013). Aquí, δ representa la vacante de oxígeno generada por la reducción del catión ceria, mientras que Δ representa al calor del proceso. La primera etapa se optimiza a temperaturas superiores a $1500^\circ C$, produciendo oxígeno (O_2), seguida de la exposición del $CeO_{2-\delta}$ al vapor de agua ($H_2O_{(g)}$) en la segunda etapa, completando así el ciclo.



El trabajo de Arifin et al. (Arifin, 2018) investigó el uso del óxido de ceria en la generación de hidrógeno mediante ciclos termoquímicos de dos etapas. En ese estudio, se abordó la cinética de la reacción relacionada para mejorar la eficiencia del ciclo de oxidación de la ceria, y esta cinética se examinó tanto experimental como analíticamente. Los resultados del estudio

revelaron que la velocidad de oxidación específica del material sigue una relación descrita por una forma similar a la ecuación de Arrhenius.

Bulfin et al. (Bulfin, 2013) examinaron el empleo de la ceria en la generación de hidrógeno mediante ciclos termoquímicos de dos etapas. El estudio abordó tanto de manera experimental como analítica la cinética de reacción en las etapas de reducción y oxidación. Esta expresión cinética se derivó a partir del seguimiento temporal de las vacantes de oxígeno, que está vinculada con la concentración de oxígeno extraíble para la etapa de reducción y con las concentraciones de vacantes y oxígeno gaseoso para la etapa de oxidación. Al examinar la variación temporal de las vacantes de oxígeno en relación con los moles de ceria, se obtiene la variación de δ en el tiempo, lo que permitió la deducción de la cinética de la reacción química tanto para la etapa de reducción como para la etapa de oxidación.

Hauessler et al. (Hauessler, 2020) se adentraron en el diseño, demostración y validación de un reactor solar de WS empleando ceria en formato de espuma porosa. Su enfoque analizó cómo la variación de la porosidad en el óxido impacta en el proceso, con resultados exitosos. Wang P. et al. (Wang, 2022) desarrollaron un modelo de ciclo termoquímico respaldado por energía solar, que incorpora el transporte de ceria porosa a dos escalas para la separación de moléculas de agua y producción de hidrógeno. La utilización de medios porosos permite alcanzar temperaturas más altas debido a un proceso interno de autorrecuperación de calor, lo que intensifica la transferencia de calor a través de distintos mecanismos (Banerjee y Paul, 2021).

En el ámbito matemático, Bubnovich y Toledo (Bubnovich y Toledo, 2007) presentaron un modelo para la combustión en medios porosos utilizando metano y aire, incorporando ecuaciones de conservación de especies, masa y energía tanto para la fase sólida como gaseosa. Esto se aplica al diseño del modelo matemático propuesto para la producción de hidrógeno por ciclos termoquímicos utilizando ceria como medio poroso, detallado en la sección 2.2.

En la búsqueda de alternativas, la energía solar concentrada se perfila como una opción atractiva para la producción de hidrógeno mediante ciclos termoquímicos, ya que puede alcanzar temperaturas por encima de los 1500°C. La energía solar fotovoltaica también se considera, ya que la electricidad generada puede transformarse directamente en energía térmica para el proceso termoquímico (Zhang, 2013).

En base a los antecedentes e investigación realizada en cuanto a producción de hidrógeno verde, sistemas de concentración solar, energía solar fotovoltaica y modelo de combustión en medios porosos, este trabajo se centra en la modelación de un reactor de WS destinado a la generación de H₂v a través del proceso termoquímico de reducción y oxidación. Específicamente, se enfoca en un ciclo termoquímico de dos etapas que involucra ceria, vapor de agua y fuentes de energía solar concentrada y fotovoltaica, considerando a la ceria como un medio poroso en formato de cilindro hueco, a diferencia del uso de polvo o pellet que se ha estudiado previamente (Arifin, 2018; Bulfin, 2013) para potenciar las distintas propiedades de transferencia de calor, masa y captación de la radiación solar en el óxido. El propósito fundamental es contribuir al avance del conocimiento en el ámbito de la producción de hidrógeno verde y, por ende, al proceso de descarbonización.

2. MODELO MATEMÁTICO

2.1. Situación física

La situación física se puede observar en la Figura 1, la que sirve de base para el modelo unidimensional propuesto. Se diseñó un reactor cilíndrico siguiendo las investigaciones previas en la literatura (Arifin, 2018; Bulfin, 2013; Hauessler, 2020), compuesto por tres cámaras, sien-

do la cámara central en donde tiene lugar la reacción de interés. El proceso de generación de hidrógeno a través de la separación de la molécula del agua se desarrolla de la siguiente manera: en primer lugar, se eleva la temperatura del óxido de cerio hasta alcanzar la temperatura de reducción. Este calentamiento se logra mediante concentración solar y resistencia eléctrica alimentada por energía solar fotovoltaica. Durante esta fase, se introduce nitrógeno como gas de arrastre para eliminar el oxígeno liberado. Una vez que el material ha sido reducido, se inicia la etapa de oxidación. En esta fase, ya no se emplea energía solar concentrada, y se inyecta solamente vapor de agua. Como resultado, se obtiene una mezcla de vapor de agua e hidrógeno en la salida del reactor.

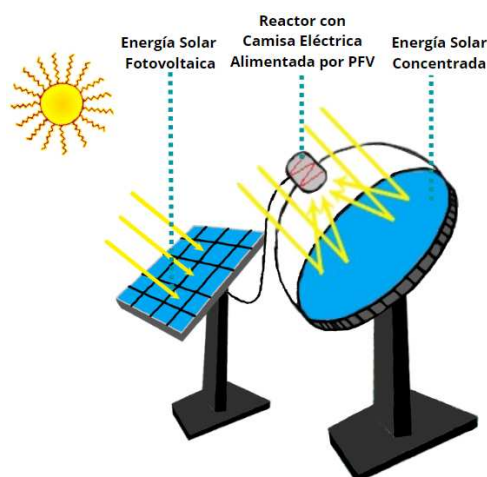


Figura 1: Esquema de situación física de reactor de water-splitting. Fuente: Elaboración propia.

El suministro de calor de la resistencia eléctrica se considera como una contribución de calor volumétrico en el modelo, mientras que el aporte de calor de la energía solar concentrada se tratará como una condición de borde que afecta a la fase sólida. La Figura 2 representa los esquemas físicos de los procesos de reducción (izquierda) y oxidación (derecha), donde la longitud del material poroso (l_p) se considera como la zona de integración. A medida que la reacción progresa, se genera transferencia de calor a través de las fases sólida y gaseosa del medio poroso, creando perfiles de temperatura $T_g(x,t)$ (temperatura en los espacios libres del medio poroso) y $T_s(x,t)$ (temperatura del sólido del medio poroso) a lo largo de este.

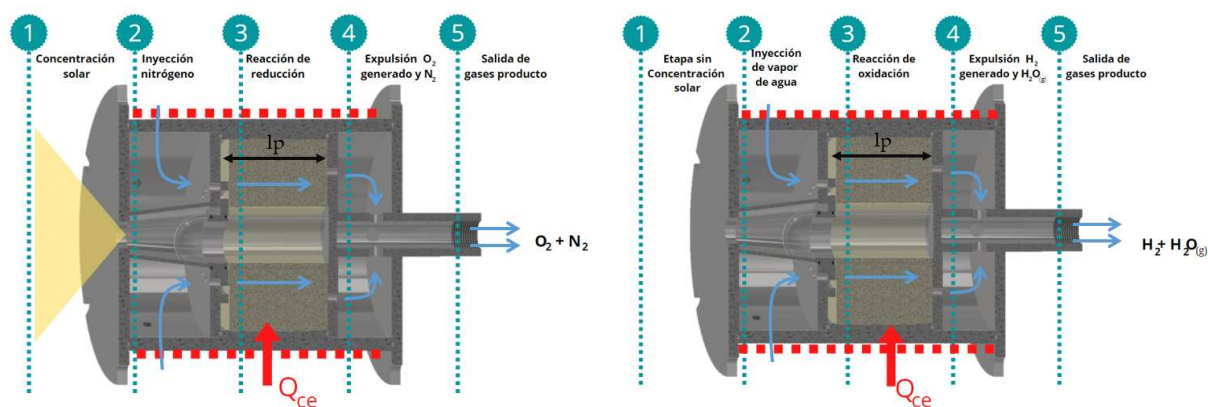


Figura 2: Situación física para etapa de reducción (izquierda), y etapa de oxidación (derecha). Fuente: Elaboración propia.

En la etapa de reducción, la generación de vacantes en la ceria (fase sólida), debido a la reacción, se representa mediante el parámetro $\delta(x,t)$, que aumenta a medida que la reacción avanza. En esta etapa, los productos de salida son nitrógeno y oxígeno liberados durante la reducción. En la etapa de oxidación, la temperatura desciende al interrumpirse el suministro de energía solar concentrada y al inyectar vapor de agua. Aquí, el material está en proceso de reoxidación, y el parámetro $\delta(x,t)$ disminuye a lo largo del material hasta llegar a cero, indicando la finalización de la reoxidación del CeO_2 . La liberación de H_2 resulta de la separación de la molécula de agua y la absorción de oxígeno, resultado de las vacantes generadas en la etapa previa. Debido a la introducción excesiva de vapor de agua para la reacción, el producto de salida consiste en una mezcla de vapor de agua e hidrógeno gaseoso.

2.2. Modelo Computacional

El desarrollo del modelo unidimensional de la configuración física involucra la integración del balance de masa y energía empleado en los modelos de combustión en medios porosos con las cinéticas de reacción definidas por Bulfin (Bulfin, 2013) y Arifin (Arifin, 2018) de las etapas de reducción y oxidación respectivamente. De manera más específica, la evolución de la vacante de oxígeno $\delta(x,t)$ está expresada mediante la Ecuación 3.

$$\frac{d\delta}{dt} = (\delta_{max} - \delta) f_{red}(\alpha) A_{red} \exp\left(\frac{-E_{red}}{RT_s}\right) - \delta [Y_{ox}(t)]^\gamma f_{ox}(\alpha) A_{ox} \exp\left(\frac{-E_{ox}}{RT_s}\right) \quad (3)$$

Donde A representa al factor pre-exponencial para la reducción y oxidación, respectivamente, tal como E representa las energías de activación. α representa el grado de completitud de la reacción y $f(\alpha)$ describe la velocidad del proceso de reducción (red) y oxidación (ox) y se describe bajo la forma $f(\alpha) = (1 - \alpha)^n$, donde n se relaciona con la tasa de avance de la reacción. R es la constante universal de los gases, T_s la temperatura del sólido, y γ el orden de la reacción de la fracción molar de oxidante, $Y_{ox}(t)$. Los parámetros utilizados se presentan en la tabla 1.

$A_{red} [\text{s}^{-1}]$	$E_{red} [\text{kJ mol}^{-1}]$	$A_{ox} [\text{s}^{-1}]$	$E_{ox} [\text{kJ mol}^{-1}]$	γ	n_{red}	n_{ox}
720.000	232	1	29	0,89	1,65	1

Tabla 1: Parámetros utilizados en cinética de reacción.

La Ecuación 4 representa la conservación de la masa de la fase gaseosa:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho_g u_g) = 0 \quad (4)$$

Donde ρ_g es la densidad de la fase gaseosa, y u_g es la velocidad de la fase gaseosa.

El balance de energía se representa por las Ecuaciones 5 y 6, siendo la primera la correspondiente a la fase gaseosa y la segunda a la fase sólida.

$$\varepsilon(\rho C_p)_g \left(\frac{\partial T_g}{\partial t} + u_g \frac{\partial T_g}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon \lambda_g \frac{\partial T_g}{\partial x} \right) - a(T_g - T_s) \quad (5)$$

$$(1 - \varepsilon)(\rho C_p)_s \frac{\partial T_s}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_{ef} \frac{\partial T_s}{\partial x} \right) + a(T_g - T_s) + Q_{ce} \pm \frac{\partial \delta}{\partial t} [Ce] \Delta h^\circ \quad (6)$$

Donde ε corresponde a la porosidad entre partículas, $(\rho C_p)_g$ y $(\rho C_p)_s$ corresponden a la densidad y calor específico del gas y sólido, respectivamente, λ_g corresponde al coeficiente de conductividad térmica del gas, y λ_{ef} al coeficiente de conductividad térmica efectiva del medio poroso, α corresponde al coeficiente intersticial de intercambio de calor, T_g y T_s corresponden a la temperatura del gas y del sólido, respectivamente, Q_{ce} corresponde al flujo de calor aportado por el calentador eléctrico, $[Ce]$ corresponde a la concentración de ceria, y $\frac{\partial \delta}{\partial t}[Ce] \Delta h^\circ$ corresponde al aporte o pérdida de calor debido a la reacción química. El último término de la ecuación de conservación de energía de la fase sólida representa la energía asociada a las reacciones químicas estudiadas, por lo que el signo de este será negativo para la etapa de reducción y positivo para la etapa de oxidación, por su naturaleza endotérmica y exotérmica, respectivamente.

Para completar el modelo matemático se consideran distintas condiciones iniciales y de borde, para luego resolver las ecuaciones presentadas mediante métodos numéricos. Se aplica una discretización mediante diferencias finitas implícitas al modelo matemático, considerando propiedades variables. La solución del sistema de ecuaciones se realiza utilizando el algoritmo de matrices tridiagonales (TDMA) o algoritmo de Thomas.

Dado que hay un exceso de nitrógeno y vapor de agua en las etapas de reducción y oxidación, respectivamente, se calcula la producción de especies por estequiometría, ya que las fracciones molares de O_2 y H_2 son cercanas a cero (Arifin, 2018).

Según la naturaleza de las ecuaciones, se ha optado por el siguiente enfoque de solución: en primer lugar, se calcula la concentración de vacantes para cada nodo, y luego se resuelven simultáneamente las ecuaciones de energía para el sólido y el gas. Una vez que las temperaturas han sido calculadas, se procede a calcular la concentración de vacantes para el siguiente paso de tiempo, repitiendo este proceso en un ciclo. Este cálculo se repite hasta que se cumpla el criterio de terminación. Una vez finalizada la etapa de reducción, se inician los cálculos para la etapa de oxidación. De manera similar a la etapa de reducción, se calcula primero la concentración de vacantes y luego se obtienen simultáneamente las temperaturas de las fases sólida y gaseosa. Este procedimiento se repite hasta cumplir el criterio de terminación.

2.3. Modelo de Comparación Cinética

Para validar el modelo desarrollado, se lleva a cabo una comparación del componente cinético del modelo con los resultados experimentales documentados en la literatura, específicamente los presentados por Arifin (Arifin, 2018). A partir de la configuración física del experimento de Arifin, se establece un modelo computacional para contrastar los resultados del modelo cinético. En esta comparativa, el modelo considerado para la evaluación no incorpora las dinámicas de fluidos presentes en el problema. Dado que se emplea polvo de óxido de cerio, se supone una penetración limitada del gas portador en la muestra, lo que permite tratar al reactante como un sistema concentrado. Las consideraciones en relación a la cinética de reacción y la producción estequiométrica de O_2 y H_2 son prácticamente las mismas que las del modelo unidimensional de reactor de separación de agua.

Sin embargo, a diferencia del modelo unidimensional, se asume que los procesos alcanzan un estado de equilibrio diferente al de la completa reducción/oxidación del material. Esta suposición implica que el valor de α se recalcula en cada simulación del proceso. Esta consideración se deriva de la probabilidad de una nueva reoxidación del material debido a la baja penetración del gas portador, lo que modifica el punto de equilibrio de la reacción. Además, el parámetro n se ajusta a 1,65 debido al uso de un formato de óxido distinto, que da lugar a una velocidad de reacción diferente y, por lo tanto, requiere una adaptación de este parámetro.

El algoritmo de solución se asemeja al empleado en el reactor unidimensional, con la excepción de que en este caso se realiza una iteración del valor α conforme a lo mencionado en la sección anterior.

3. RESULTADOS

3.1. Resultados modelo de comparación cinética

Arifin (Arifin, 2018) reporta la producción de oxígeno e hidrógeno a distintas temperaturas de manera gráfica, lo que se observa en la Figura 3, donde además se presenta la curva de tendencia, y los resultados obtenidos con el modelo de validación antes expuesto. Respecto a la producción de oxígeno, se observa que existe una leve variación entre ambos resultados, pero el orden de magnitud y la tendencia de las curvas en el rango de temperaturas expuesto es similar. Para el caso de la producción de hidrógeno, las curvas obtenidas en ambos casos presentan la misma tendencia, y los órdenes de magnitud son prácticamente los mismos. Este resultado permite validar la cinética utilizada en el modelo matemático propuesto.

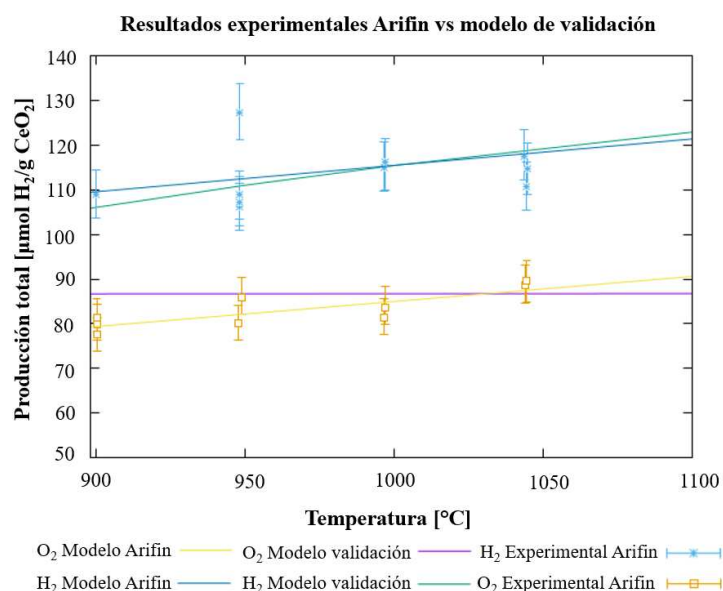


Figura 3: Producción de O₂ y H₂ durante WS a diferentes temperaturas (Arifin, 2018), y comparación de resultados experimentales con resultados de modelo de validación.

Una vez validado el modelo, es posible realizar distintas simulaciones y análisis variando parámetros importantes que pueden ser tomados en consideración en las pruebas experimentales, con el fin de maximizar la producción de hidrógeno de la manera más eficiente posible.

3.2. Resultados modelo 1D

La Tabla 2 resume los parámetros empleados en el modelo matemático. En esta instancia, el calor de entrada solar en la etapa de reducción se calcula mediante métodos numéricos.

Q_{red} W	Q_{ox} W	Q_{ce} W/m ³	lp m	n	Δt	u_{N_2} m/s	u_{H_2O} m/s
30	0	3.000.000	0,074	800	0,02	8	2

Tabla 2: Parámetros utilizados para simulación computacional comparativa.

La Figura 4 (izquierda) presenta el perfil de temperaturas del gas durante la fase de reducción. Se destaca que la temperatura máxima numérica, utilizando parámetros experimentales, ronda los 1100 K. Además, se observa que la región $x=0$ del reactor presenta una temperatura superior en comparación con la segunda parte del reactor.

La Figura 4 (derecha) presenta el perfil de temperatura en la fase gaseosa durante la etapa de oxidación. Conforme a las expectativas, se constata un enfriamiento progresivo en el interior del reactor a medida que avanza el tiempo, donde se observa un rango de operación de entre 850 K y 420 K.

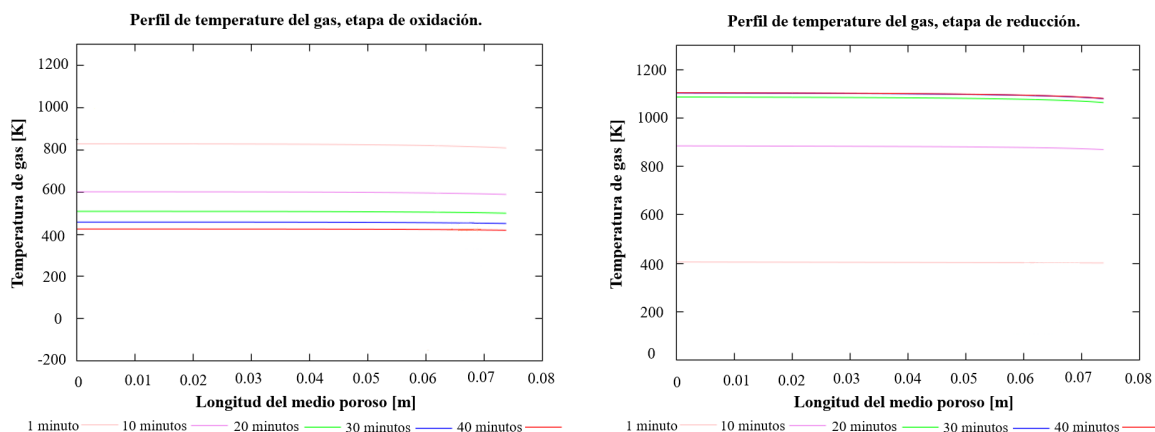


Figura 4: Perfil térmico de la fase gaseosa obtenido numéricamente. Etapa de reducción (izquierda) y etapa de oxidación (derecha).

La Figura 5 brinda una comprensión completa del proceso de reducción y de oxidación a través de los resultados numéricos obtenidos. Durante la etapa de reducción, se observa una notoria disparidad entre los perfiles térmicos de las fases, principalmente debido a que la reacción de reducción es endotérmica, y ocurre en la fase sólida, lo que provoca una disminución en la temperatura en esta. Por otro lado, en los perfiles térmicos de la etapa de oxidación, las diferencias de temperatura son prácticamente insignificantes, ya que la reacción de oxidación es exotérmica y libera una cantidad de energía despreciable en comparación con otras fases energéticas del reactor.

3.3. Variación de Parámetros

Con el objetivo de identificar posibles mejoras aplicables al sistema de producción de hidrógeno, se realizan simulaciones numéricas variando diversos parámetros controlables experimentalmente.

Primero, al modificar la velocidad de flujo de los gases de entrada (nitrógeno y vapor de agua), se observa que un aumento en la velocidad del nitrógeno (de 2 a 10 m/s) resulta en mayores temperaturas en la etapa de reducción. Esto se debe a un incremento en la transferencia de calor entre las fases sólida y gaseosa a lo largo del reactor debido a una mayor turbulencia. En detalle, se estudiará en una siguiente etapa el cómo afecta la variación de la velocidad en el coeficiente de transferencia de calor. Mayor temperatura beneficia la generación de vacantes en la etapa de reducción, lo que a su vez impulsa la producción de hidrógeno en la etapa de oxidación, donde el oxígeno liberado de la molécula de agua ocupa los sitios disponibles, favoreciendo la producción de hidrógeno, lo cual se puede observar en la Figura 6 (derecha).

Otro parámetro influyente en la mejora de la producción de hidrógeno es el aumento del

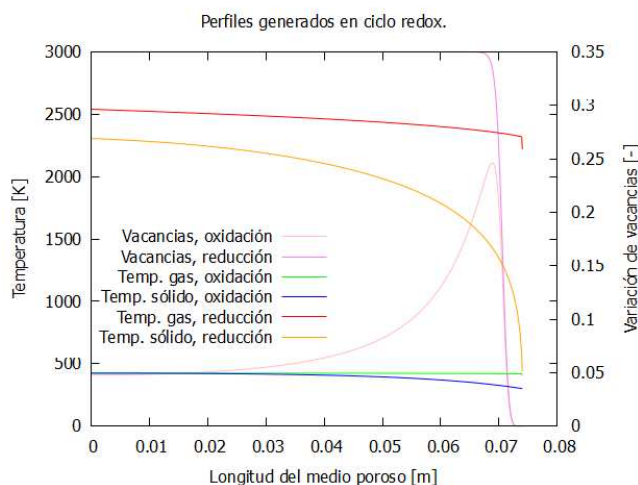


Figura 5: Resultados numéricos de ciclo redox.

aporte de concentración solar en la etapa de reducción. Este incremento conduce a un aumento en las temperaturas de ambas fases, elevándolas desde los 1100 K previos hasta cerca de 2300 K. La mejora de producción de hidrógeno se observa en la Figura 6 (izquierda). En una siguiente etapa de estudio, se determinarán qué materiales son más apropiados para la estructura del reactor, según su resistencia térmica.

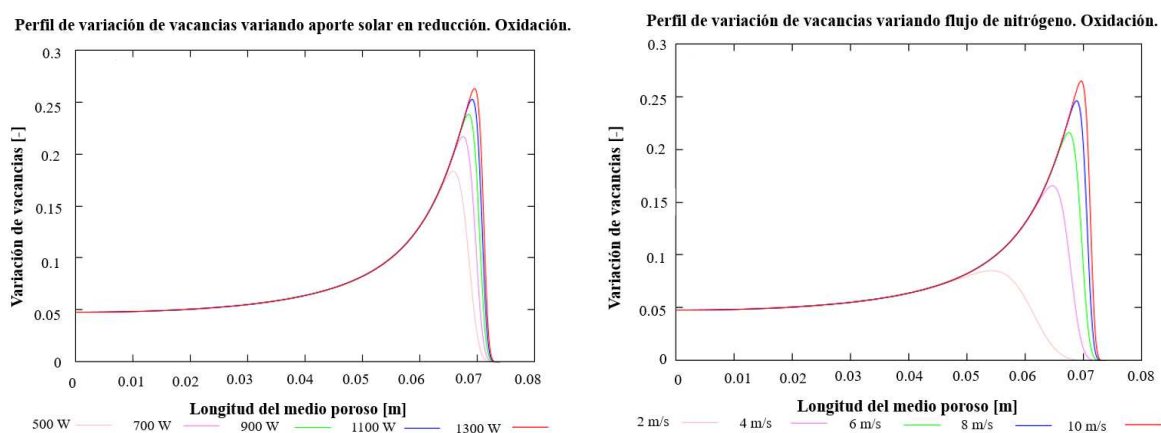


Figura 6: Variación de vacancias de la etapa de oxidación variando el aporte solar en la etapa de reducción (izquierda), y variando el flujo de nitrógeno (derecha).

Asimismo, se varía el tiempo de inyección de los gases de entrada en ambas etapas (nitrógeno y vapor de agua) de 10 a 50 minutos. En relación a la inyección de nitrógeno, las temperaturas alcanzadas no experimentan cambios significativos, pero se observa un ligero aumento en la generación de vacancias en la etapa de reducción y en la producción de hidrógeno en la etapa de oxidación, lo cual se puede observar en la Figura 7 (derecha). Esto se debe a un mayor tiempo de arrastre de las moléculas de oxígeno liberadas. En cuanto a la inyección de vapor de agua, los perfiles térmicos de la etapa de oxidación disminuyen, lo que es coherente, dado que el aporte energético no es suficiente para mantener temperaturas elevadas. En términos de la variación de las vacantes en la etapa de oxidación, se encuentra que ésta es más pronunciada con tiempos de inyección de vapor más cortos, aunque presenta una ligera disminución a medida que el tiempo aumenta. Esto sugiere un efecto positivo en la producción de hidrógeno con tiempos más cortos

de inyección de vapor, como se observa en la Figura 7 (izquierda).

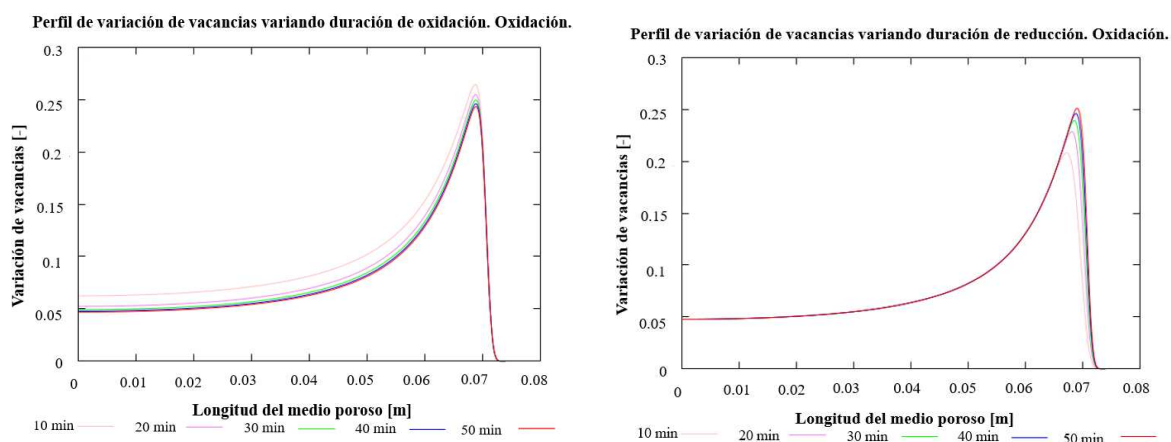


Figura 7: Variación de vacancias de la etapa de oxidación variando el tiempo de inyección de vapor de agua (izquierda) y nitrógeno (derecha).

4. CONCLUSIONES

Se ha llevado a cabo una investigación centrada en la producción de hidrógeno verde mediante ciclos termoquímicos de dos etapas (reducción-oxidación), haciendo uso del óxido de cerio en formato de espuma porosa, empleando energía solar derivada tanto de un disco parabólico como de una planta fotovoltaica.

En este proceso, se ha desarrollado y aplicado un modelo matemático unidimensional con el fin de comprender en profundidad la producción de hidrógeno mediante el reconocimiento de perfiles térmicos en las fases sólida y gaseosa, junto con la variación de las vacancias a lo largo de un reactor de WS. Los resultados numéricos indican que se pueden obtener niveles de hasta $2000 \mu\text{mol}$ de H_2 por gramo de ceria, con temperaturas en la fase gaseosa que se sitúan cerca de 1100 K para la etapa de reducción, y por debajo de los 850 K para la etapa de oxidación.

Esta investigación ha permitido identificar las variables más influyentes en el proceso termoquímico que ocurre dentro del reactor de WS. Se ha demostrado que el aumento de la contribución de la concentración solar en la etapa de reducción conlleva la obtención de temperaturas más elevadas en ambas fases durante esta etapa, lo que resulta en un incremento de las vacantes disponibles. Asimismo, el incremento en el caudal de entrada de gas inerte (nitrógeno) provoca un aumento en la transferencia de calor en el interior de la cámara de reacción, intensificando la transferencia de moléculas de oxígeno desde el óxido. Esto, a su vez, conduce a una mayor producción de hidrógeno en la etapa de oxidación. Por último, se obtuvo que al extender el tiempo de inyección de nitrógeno o vapor de agua, se logra un aumento en la producción de hidrógeno, gracias al incremento en la transferencia de moléculas entre la ceria y el gas en cada etapa del proceso.

AGRADECIMIENTOS

Se expresa agradecimiento a la Dirección de Postgrado y Programas de la Universidad Técnica Federico Santa María, Chile, por su apoyo financiero mediante la Beca Asistencia a Congresos y Pasantías de Investigación, al Proyecto InES de Género en I+D+i+e (INGE210004) y a la Agencia Nacional de Investigación y Desarrollo (Proyecto FONDAF 15110019/SERC-Chile).

REFERENCIAS

- Arifin D.e.a. Kinetics and mechanism of solar-thermochemical h₂ and co production by oxidation of reduced ceo₂. *Solar energy*, 160:178–185, 2018.
- Banerjee A. y Paul D. Developments and applications of porous medium combustion: A recent review. *Energy*, 221:119868, 2021.
- Bhosale R. y AlMomani F. Hydrogen production via solar driven thermochemical cerium oxide-cerium sulfate water splitting cycle. *International Journal of Hydrogen Energy*, 45:10381–10390, 2020.
- Bubnovich V. y Toledo M. Analytical modelling of filtration combustion in inert porous media. *Applied Thermal Engineering*, 27:1144–1149, 2007.
- Bulfin B.e.a. Analytical model of ceo₂ oxidation and reduction. *The journal of physical chemistry*, 117:24129–24137, 2013.
- Dawood F.e.a. Hydrogen production for energy: An overview. *International Journal of Hydrogen Energy*, 45:3847–3869, 2020.
- Fragiacomo P. y Genovece M. Modeling and energy demand analysis of a scalable green hydrogen production system. *International Journal of Hydrogen Energy*, 44:30237–30255, 2019.
- Gager E.e.a. Reticulated porous lanthanum strontium manganite structures for solar thermochemical hydrogen production. *International Journal of Hydrogen Energy*, 47:31152–31164, 2022.
- Haeussler A.e.a. Remarkable performance of microstructures ceria foams for thermochemical splitting of h₂o and co₂ in a novel hightemperature solar reactor. *Chemical engineering research and design*, 156:311–323, 2020.
- Ishaq H.e.a. A review on hydrogen production and utilization: Challenges and opportunities. *International Journal of Hydrogen Energy*, 45:26238–26264, 2022.
- Mehrpooya M. y Habibi R. A review on hydrogen production thermochemical ws cycles. *Journal of Cleaner Production*, 275:123836, 2020.
- Oliveira A.e.a. A green hydrogen economy for a renewable energy society. *Chemical Engineering*, 33:100701, 2021.
- production via two-step water splitting thermochemical cycle based on metal oxide A review. H. *Applied Energy*, 267:114860, 2020.
- Safari F. y Dincer I. A review and comparative evaluation of thermochemical water splitting cycles for hydrogen production. *Energy Conversion and Management*, 205:112182, 2020.
- Wang P.e.a. A dual-scale transport model of the porous ceria based on solar thermochemical cycle water splitting hydrogen production. *Energy Conversion and Management*, 272:116363, 2022.
- Zhang H.e.a. Concentrated solar power plants: Review and design methodology. *Renewable and sustainable energy reviews*, 22:466–481, 2013.