

Efecto de la temperatura en la conversión del p-cimeno hacia hollín e hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAHs)

Rodrigo Casasnovas, María U. Alzueta, Katiuska Alexandrino.

Grupo de procesos termoquímicos (GPT)

Instituto de Investigación en Ingeniería de Aragón (I3A)

Universidad de Zaragoza, Mariano Esquillor s/n, 50018, Zaragoza, Spain.

e-mail: 872320@unizar.es

Resumen

En este trabajo se evalúa experimentalmente la tendencia del p-cimeno a formar hollín e hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAHs) durante su pirólisis. Los experimentos se realizaron en un reactor de flujo en el intervalo de temperatura de 900-1200 °C, con el objetivo de determinar su viabilidad como combustible sostenible de aviación (SAF).

Introducción

La mitigación del impacto ambiental en el sector aeronáutico es uno de los grandes retos tecnológicos actuales. En la búsqueda de SAFs, el p-cimeno se presenta como un candidato prometedor debido a su elevada densidad energética. Sin embargo, al ser un compuesto aromático, puede ser propenso a generar PAHs mediante procesos de crecimiento de anillos y materia particulada (hollín) durante su degradación térmica [1].

El conocimiento de la tendencia a formar hollín es de gran interés para validar el uso de nuevos combustibles derivados de terpenos y cicloalcanos [2]. Por ello, este trabajo se centra en el estudio experimental de la formación de hollín y PAHs en el hollín, en la pirólisis del p-cimeno a diferentes temperaturas, aportando datos para evaluar su viabilidad real.

Experimental

Los experimentos de pirólisis se han realizado en un reactor tubular colocado en el interior de un horno eléctrico de alta temperatura, usando un flujo total de 1000 mLN/min, y 1000 ppm de p-cimeno con Ar. El p-cimeno ha sido introducido al reactor usando una bomba HPLC con una línea calorifugada. Los experimentos de hollín han sido realizados a 900, 1000, 1100 y 1200 °C.

El hollín formado y que es arrastrado por el gas, es recolectado en un filtro, mientras que el gas es analizado usando dos cromatógrafos. Los 16 EPA-PAHs en el hollín son extraídos en un sistema Soxhlet usando diclorometano como disolvente. Posteriormente, el extracto se concentra utilizando un rotavapor antes de proceder a su análisis en un cromatógrafo acoplado a un masas [3].

Resultados y discusión

La evolución de los rendimientos a hollín, gases y PAHs en el hollín, en función de la temperatura se presenta en la Figura 1. Se observa que, con el aumento de la temperatura, el rendimiento a hollín aumenta, alcanzando un valor de aproximadamente 66 % a 1200 °C. Por otro lado, el rendimiento a gas disminuye con el aumento de la temperatura y el rendimiento a PAHs presenta un máximo a 1000 °C. A partir de esta temperatura el rendimiento a hollín es más acentuado, indicando que el consumo de gases y

PAHs en por la participación en el proceso de formación de hollín.

La Figura 2 detalla la concentración de los PAHs en el hollín para cada temperatura estudiada. Se puede observar que las especies de 2-3 anillos, especialmente NAPH, ACNY, PHEN, son las que predominan, lo cual es característico de la desestabilización térmica de precursores alquil-aromáticos como el p-cimeno [1].

A partir de los 1000 °C, se observa una disminución de las concentraciones. Esto es porque estas especies reaccionan mediante diferentes mecanismos, como el mecanismo Hydrogen Abstraction-Acetylene Addition (HACA), favoreciendo el crecimiento del hollín [1].

Conclusiones

Los resultados de la pirólisis de p-cimeno señalan que el rendimiento a hollín aumenta con la temperatura y el rendimiento a gases y PAHs disminuye. Se comprueba que a temperaturas superiores a los 1000 °C la tendencia de formar hollín del p-cimeno es alta. Un dato que se deberá tener en cuenta al momento de usarlo como SAF.

Agradecimientos

This work has received funding from the European Union's Horizon Europe research and innovative program under the Marie Skłodowska-Curie grant agreement no. 101150862. Views and opinions expressed are however those of the authors only and do not necessarily reflect those of the European Union or the European Research Executive Agency (REA). Neither the European Union nor the granting authority can be held responsible for them. The authors express their gratitude to projects PID2021-14320OB-I00, TED2021-129557B-I00 and PID2025-155489OB-I00, funded by MCIN, AEI/10.13039/501100011033,

“ERDF A way of making Europe”, by the European Union and to Aragón Government (Ref. T22_23R).

Referencias

1. ALTARAWNEH, M.N. and Ali, L. Formation of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs) in Thermal Systems: A Comprehensive Mechanistic Review. *Energy & Fuels*, 2024, 38(22), 21735–21792. DOI: 10.1021/acs.energyfuels.4c03513.
2. Zhang, Y., et al. Flow Reactor Study of the Soot Precursors of Novel Cycloalkanes as Synthetic Jet Fuel Compounds: Octahydroindene, p-Menthane, and 1,4-Dimethylcyclooctane. *Energy & Fuels*, 2025, 39 (45), 22048–22060. DOI: 10.1021/acs.energyfuels.5c03795.
3. VITERI, F., SALINAS, J., MILLERA, Á., BILBAO, R. and ALZUETA, M.U. Pyrolysis of dimethyl carbonate: PAH formation. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 2016, vol. 122, p. 524-530. DOI: 10.1016/j.jaap.2016.09.011

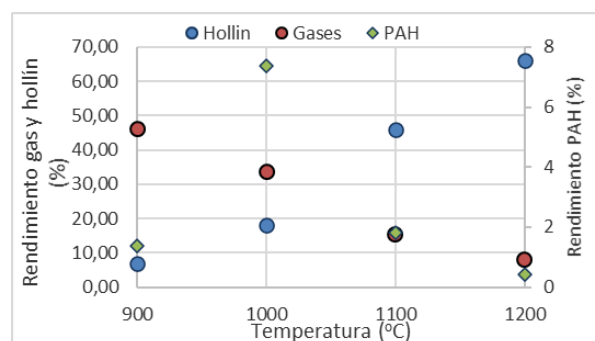


Figura 1. Rendimiento a hollín, gases y a PAH en el hollín en la pirólisis del p-cimeno.

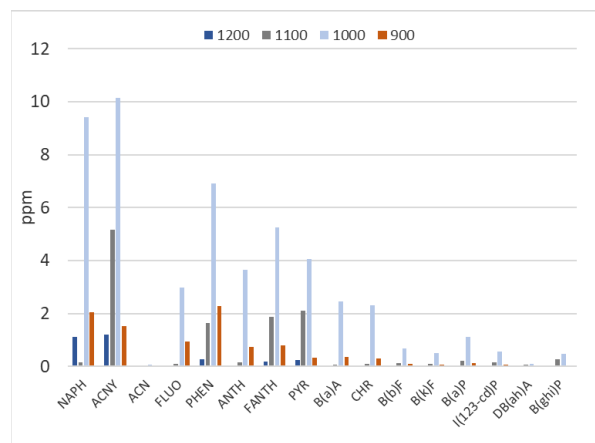


Figura 2. Concentración de PAH en el hollín para cada temperatura.