

# Estudio de la oxidación de mezclas NH<sub>3</sub>/N<sub>2</sub>O

Daniel A. Manzano-Peña, Adrián Ruiz-Gutiérrez, María U. Alzueta

Grupo de procesos termoquímicos (GPT)  
Instituto de Investigación en Ingeniería de Aragón (I3A)  
Universidad de Zaragoza, Mariano Esquillor s/n, 50018, Zaragoza, Spain.  
Tel. +34-976762707, e-mail: [819708@unizar.es](mailto:819708@unizar.es)

## Resumen

Se presenta un estudio experimental y cinético sobre la oxidación de mezclas NH<sub>3</sub>/N<sub>2</sub>O en un reactor de flujo homogéneo. Se analizan los efectos ocasionados por diferentes parámetros (temperatura, ratio de exceso de O<sub>2</sub> y ratio de la mezcla NH<sub>3</sub>/N<sub>2</sub>O). Con ello, se pretende estudiar el comportamiento del amoníaco en presencia de uno de los contaminantes que se forman durante su oxidación.

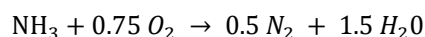
## Introducción

El amoníaco (NH<sub>3</sub>) ha despertado un creciente interés como vector energético libre de emisiones directas de CO<sub>2</sub>, debido a su alta densidad energética, facilidad de almacenamiento y síntesis, así como su compatibilidad con infraestructuras existentes. Adicionalmente, este combustible se puede producir a partir de energías renovables como la solar y la eólica [1]. Sin embargo, su combustión afronta una serie de desafíos, ya que conlleva la formación de óxidos de nitrógeno (NO<sub>x</sub>), compuestos con elevado impacto ambiental. En particular, el N<sub>2</sub>O posee un potencial de calentamiento global aproximada de 300 veces superior al del CO<sub>2</sub>, lo que convierte su control en una prioridad [2]. Este estudio aborda la interacción entre NH<sub>3</sub> y N<sub>2</sub>O en un reactor de flujo homogéneo tanto de forma experimental como por la realización de simulaciones, con el objetivo de identificar condiciones que minimicen la formación de contaminantes [3], así como las interacciones que tienen lugar en la experimentación llevada a cabo.

## Metodología experimental

Los experimentos se realizaron en un reactor de flujo homogéneo de cuarzo, a presión atmosférica. El argón se empleó como gas mayoritario para asegurar una atmósfera inerte, facilitándose los balances de nitrógeno en el sistema. Con el fin de que todos los experimentos se realizaran a condiciones isotérmicas ( $\pm 10$  K), se utilizó un horno eléctrico con tres resistencias distribuidas uniformemente en la zona de trabajo. Todos los experimentos se llevaron a cabo en un rango de temperaturas entre 875-1425 K. Se

introdujeron NH<sub>3</sub>, N<sub>2</sub>O, O<sub>2</sub> y Ar en diferentes proporciones ([NH<sub>3</sub>]/[N<sub>2</sub>O] = 1), estudiándose la ratio de exceso de O<sub>2</sub> ( $\lambda = 0, 0.5, 1, 3$ ). Para el cálculo de  $\lambda$ , se tuvo en cuenta la reacción 1, y se utilizó la ecuación 1. Las concentraciones de NH<sub>3</sub>, N<sub>2</sub>O, O<sub>2</sub>, NO, N<sub>2</sub> y H<sub>2</sub> fueron medidas a la salida del reactor mediante un analizador en continuo y un micro cromatógrafo de gases.



Reacción 1. Oxidación en condiciones ideales del NH<sub>3</sub>.

$$\lambda = \frac{[\text{O}_2]_{\text{real}}}{[\text{O}_2]_{\text{estequiométrico}}} = \frac{[\text{O}_2]_{\text{real}}}{0.75 [\text{NH}_3]}$$

Ecuación 1. Cálculo de  $\lambda$ .

Las condiciones iniciales de los experimentos se muestran en la Tabla 1. Adicionalmente, se utilizó el software Chemkin-Pro para la realización de las simulaciones de los diferentes experimentos. Para la realización de estas simulaciones, se seleccionó el modelo cinético presentado por Glarborg et al. [4] como base, con pequeñas modificaciones posteriores.

Tabla 1. Condiciones iniciales de los experimentos realizados, siendo el tiempo de residencia  $tr(s)=191,11/T(K)$ .

| EXP | [NH <sub>3</sub> ] (ppm) | [N <sub>2</sub> O] (ppm) | [NH <sub>3</sub> ]/[N <sub>2</sub> O] | $\lambda$ |
|-----|--------------------------|--------------------------|---------------------------------------|-----------|
| 1   | 1000                     | 1000                     | 1                                     | 0         |
| 2   | 1000                     | 1000                     | 1                                     | 0.5       |
| 3   | 1000                     | 1000                     | 1                                     | 1         |
| 4   | 1000                     | 1000                     | 1                                     | 3         |

## Resultados y discusión

La conversión de NH<sub>3</sub> aumenta de forma notable con la temperatura tanto en los resultados experimentales como en las simulaciones, Figura 1A. No obstante, las simulaciones predicen una conversión más rápida, con una caída significativa de NH<sub>3</sub> entre 1073 y 1273 K, mientras que en los datos experimentales se observa una conversión más gradual. Aunque, a día de hoy, no sabemos cuál es la razón de la

discrepancia observada, la buena repetitividad de los experimentos parece sugerir que puede atribuirse a la necesidad de mejora del modelo cinético. A bajas temperaturas (875–1075 K), especialmente en defecto de  $O_2$  ( $\lambda < 1$ ), la conversión de  $NH_3$  es limitada, lo que refleja una combustión incompleta. En cambio, a medida que se incrementa la temperatura y se introduce un exceso de oxígeno ( $\lambda = 3$ ), la oxidación se vuelve mucho más eficiente, alcanzando una conversión prácticamente total.

En cuanto al óxido nitroso ( $N_2O$ ), Figura 1B, se observan altas concentraciones a bajas temperaturas, debido a la falta de energía térmica suficiente para activar su conversión. En los ensayos experimentales, su concentración comienza a disminuir de forma notable a partir de los 1273 K, mientras que en las simulaciones la reducción es más progresiva. Este comportamiento sugiere que, además de la temperatura, una atmósfera oxidante puede favorecer tanto la descomposición térmica como otras rutas de reacción en las que participan especies intermedias que dan lugar a la formación de radicales [1].

## Conclusiones

Los resultados obtenidos permiten comprender el comportamiento en función de la temperatura de las mezclas  $NH_3/N_2O$ , en condiciones experimentales bien controladas. Se ha demostrado que la conversión de  $NH_3$  y la descomposición de  $N_2O$  dependen fuertemente de la temperatura y de la disponibilidad de  $O_2$ . Las simulaciones anticipan una reactividad algo mayor que la observada experimentalmente, sugiriendo así la necesidad de ajustar el modelo cinético a emplear. En general, la eficiencia de conversión mejora claramente en atmósferas oxidantes y a temperaturas superiores a 1000 °C, lo que refuerza la utilidad de este estudio para el desarrollo de tecnologías de combustión de  $NH_3$  más eficientes. Estos hallazgos constituyen una base sólida para futuras investigaciones dirigidas a optimizar la conversión de  $NH_3$  y perfeccionar las

estrategias de control de emisiones, así como aportar un mayor conocimiento sobre las interacciones del  $NH_3$  y  $N_2O$ .

## AGRADECIMIENTOS

Los autores expresan su agradecimiento a las subvenciones PID2021-12432OB-I00 y TED2021-129557B-I00, financiadas por MCIN/AEI/10.13039/501100011033, “FEDER Una manera de hacer Europa”, por la “Unión Europea”, así como al Gobierno de Aragón (Ref. T22\_23R). Asimismo, se agradece al Instituto de investigación en ingeniería de Aragón (I3A) por la concesión de una beca que ha hecho posible el desarrollo de esta investigación.

## REFERENCIAS

- [1]. CAMPION, N., NAMI, H., SWISHER, P.R., VANG HENDRIKSEN, P. y MÜNSTER, M. *Techno-economic assessment of green ammonia production with different wind and solar potentials*. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2023, vol. 173, art. 113057. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2022.113057>
- [2]. ZHAO, Chunhong, LIU, Ziping, WANG, Huimin, DAI, Xiaoqin, MENG, Shengwang, FU, Xiaoli, JIANG, Qunou, LV, Wenjun, CHEN, Jiancheng y GAO, Decai. *Increased global warming potential during freeze-thaw cycle is primarily due to the contribution of  $N_2O$  rather than  $CO_2$* . Science of The Total Environment, 2024, vol. 954, art. 176232. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2024.176232>
- [3]. WANG, Qiao, WANG, Huanhuan, CHEN, Haodong, LIAO, Wanxiong, LIU, Zhongkai, HU, Zhihong, SUI, Ran, WANG, Zhandong y YANG, Bin. *New insights into the  $NH_3/N_2O/Ar$  system: Key steps in  $N_2O$  evolution*. Proceedings of the Combustion Institute, 2024, vol. 40, art. 105236. <https://doi.org/10.1016/j.proci.2024.05.236>
- [4]. G LARBORG, Peter, MILLER, James A., RUSCIC, Branko y KLIPPENSTEIN, Stephen J. *Modeling nitrogen chemistry in combustion*. Progress in Energy and Combustion Science, 2018, vol. 67, pp. 31–68. <https://doi.org/10.1016/j.pecs.2018.01.002>

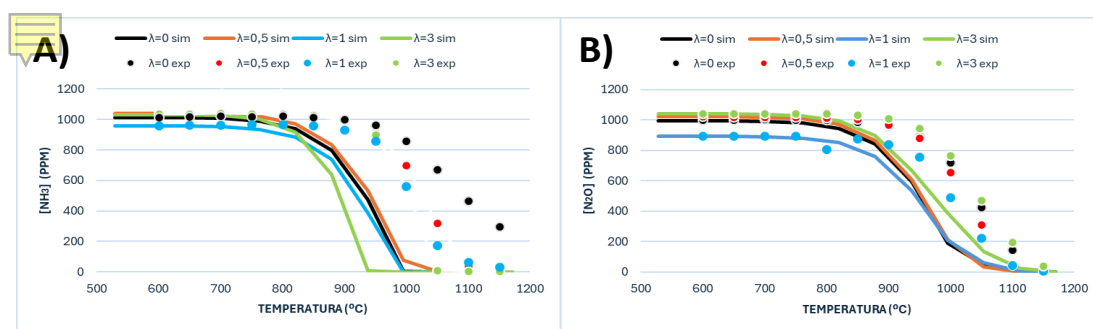


Figura 1. Perfil de especies para A)  $NH_3$  y B)  $N_2O$  en diferentes condiciones de  $\lambda$ .