

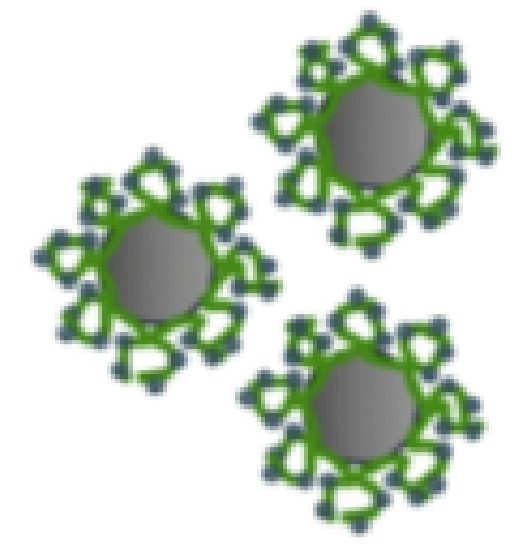
# MODELADO DEL FLUJO DE NANOFUIDOS ESTABLES DE NANOPARTÍCULAS DE HIERRO CEROVALENTE A TRAVÉS DE UN LECHO POROSO

Binetti Basterrechea Gian Franco<sup>1</sup>, Ambe Micaela<sup>1</sup>, Crespi Julieta<sup>1,2,3</sup>, y Quici Natalia<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>Centro de Tecnologías Químicas, Departamento de Ingeniería Química, Facultad Regional Buenos Aires, Universidad Tecnológica Nacional

<sup>2</sup>Instituto Sabato, Comisión Nacional de Energía Atómica, Universidad Nacional de San Martín

<sup>3</sup>Gerencia Química, Comisión Nacional de Energía Atómica, Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas de Argentina



## Introducción

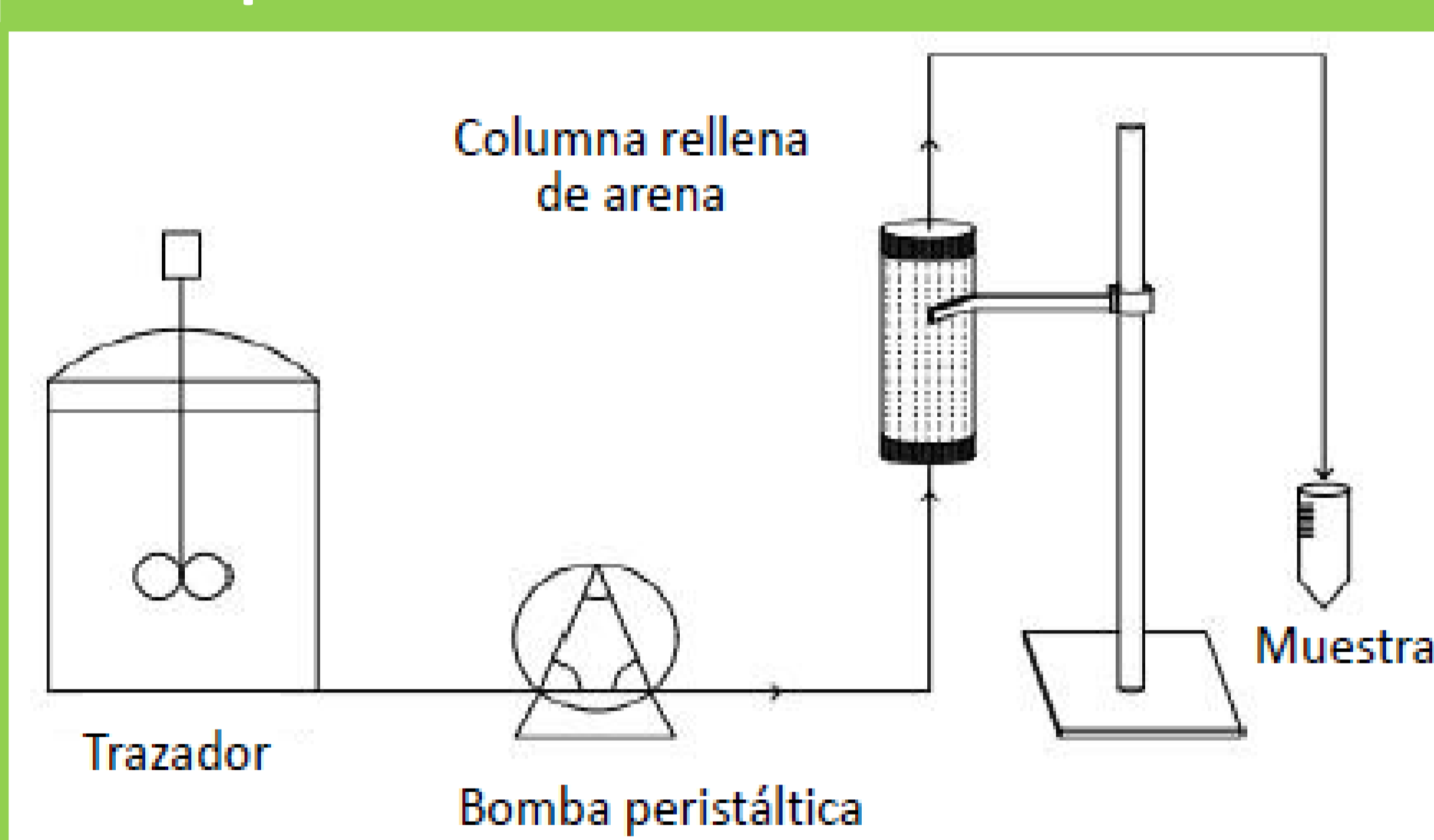
La remoción de contaminantes acuosos por medio de nanopartículas de hierro cerovalente (nZVI) resulta un método eficaz y sustentable para descontaminar aguas desde su fuente al punto de uso. Estas nanopartículas (NPs) pueden remover, mediante adsorción en su superficie o a través de reacciones redox, diversos contaminantes, y pueden ser inyectadas en suelo para tratamiento de aguas subsuperficiales. Sin embargo, la tendencia de las NPs a aglomerarse reduce la eficiencia del transporte. Como solución a este problema, se ha propuesto la modificación de las NPs por medio de coberturas polielectrolíticas para inhibir su agregación, mejorar su estabilidad y su movilidad coloidal y, así, formar nanofluidos (NFs). A su vez, el modelado del transporte de los NFs resulta una herramienta fundamental para lograr simulaciones confiables que permitan optimizar aplicaciones futuras en escala de campo.

## Objetivos

El objetivo de este trabajo fue estudiar el flujo en lecho poroso a escala laboratorio y piloto, de un NF conformado por una suspensión de NPs de hierro estabilizado con carboximetilcelulosa (CMC). Para estimar las variables intervinientes en el flujo en columna, se empleó un *software* computacional para facilitar los cálculos.

## Estrategias, Métodos y Teoría

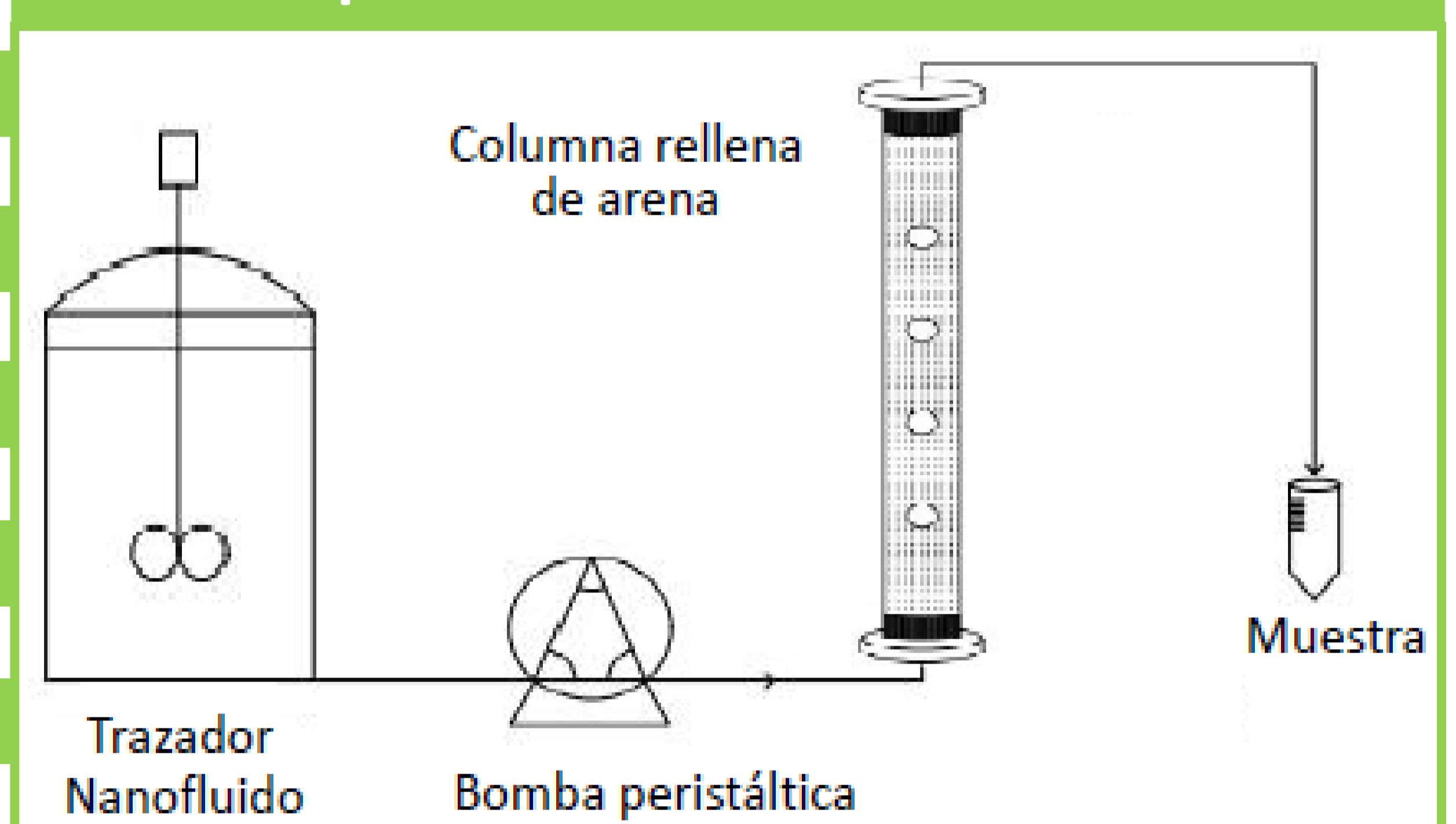
### Experimentos en Escala Laboratorio



### Trazador

NaCl 0,4 g/l	NaCl 15 g/l
NF	
—	CMC 5 g/l + Fe 0,5 g/l
Diámetro de columna	
1 cm	4 cm
Altura de la columna	
25 cm	50 cm
Altura del lecho poroso	
21 cm	46 cm
Caudal	
12 ml/min	30 ml/min

### Experimentos en Escala Piloto



## Modelado de curvas de flujo

### Análisis y procesamiento de datos



- “Micro and Nanoparticle transport, filtration and clogging Model Suite” (MNM).
- Análisis analítico de 1° (Dirichlet) y 3° (Robin) tipo.
- Análisis numérico (método de diferencias finitas).

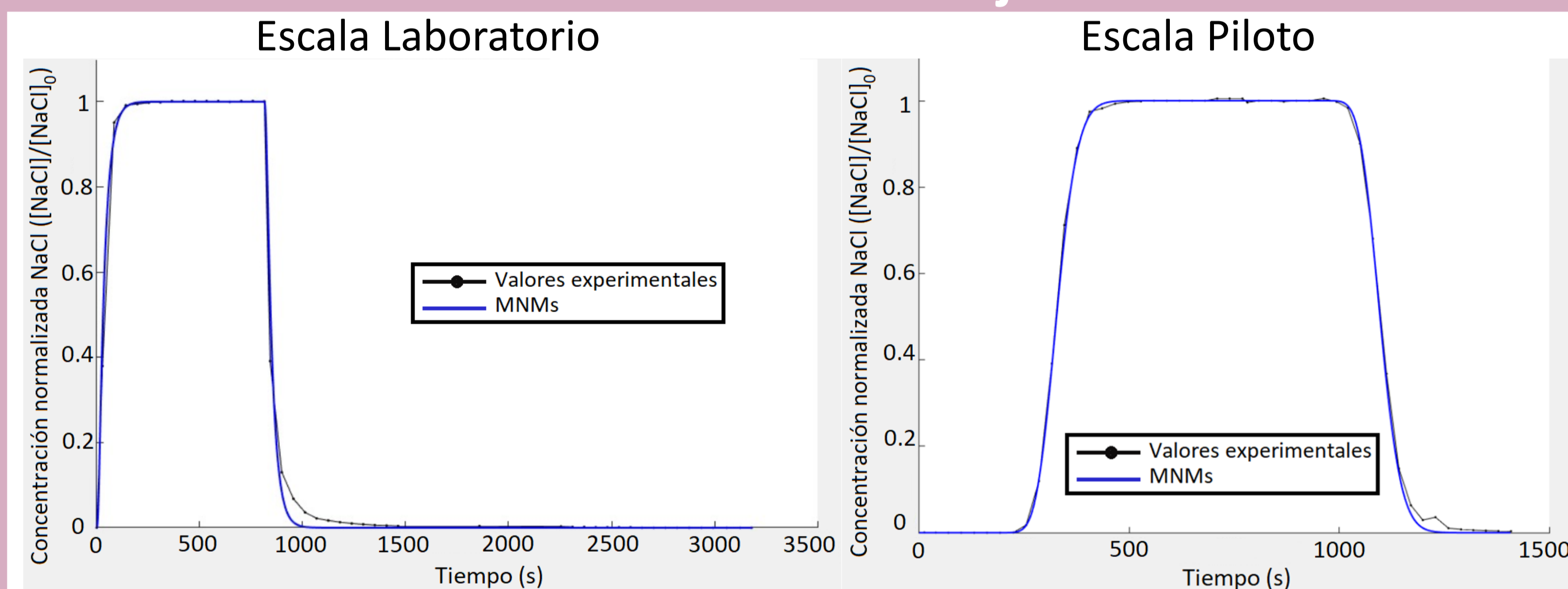
### Ecuación Advección—Dispersión en 1D<sup>[1-3]</sup>

$$\begin{cases} n \frac{dc}{dt} + \rho_b \frac{ds}{dt} = nD \frac{d^2c}{dx^2} - q \frac{dc}{dx} \\ \rho_b \frac{ds}{dt} = f(c, s) \end{cases}$$

- Intervención de fenómenos físicos (*straining*).
- Intervención de fenómenos físico-químicos (*linear, ripening, blocking*).

## Resultados

### Curvas de flujo Trazador



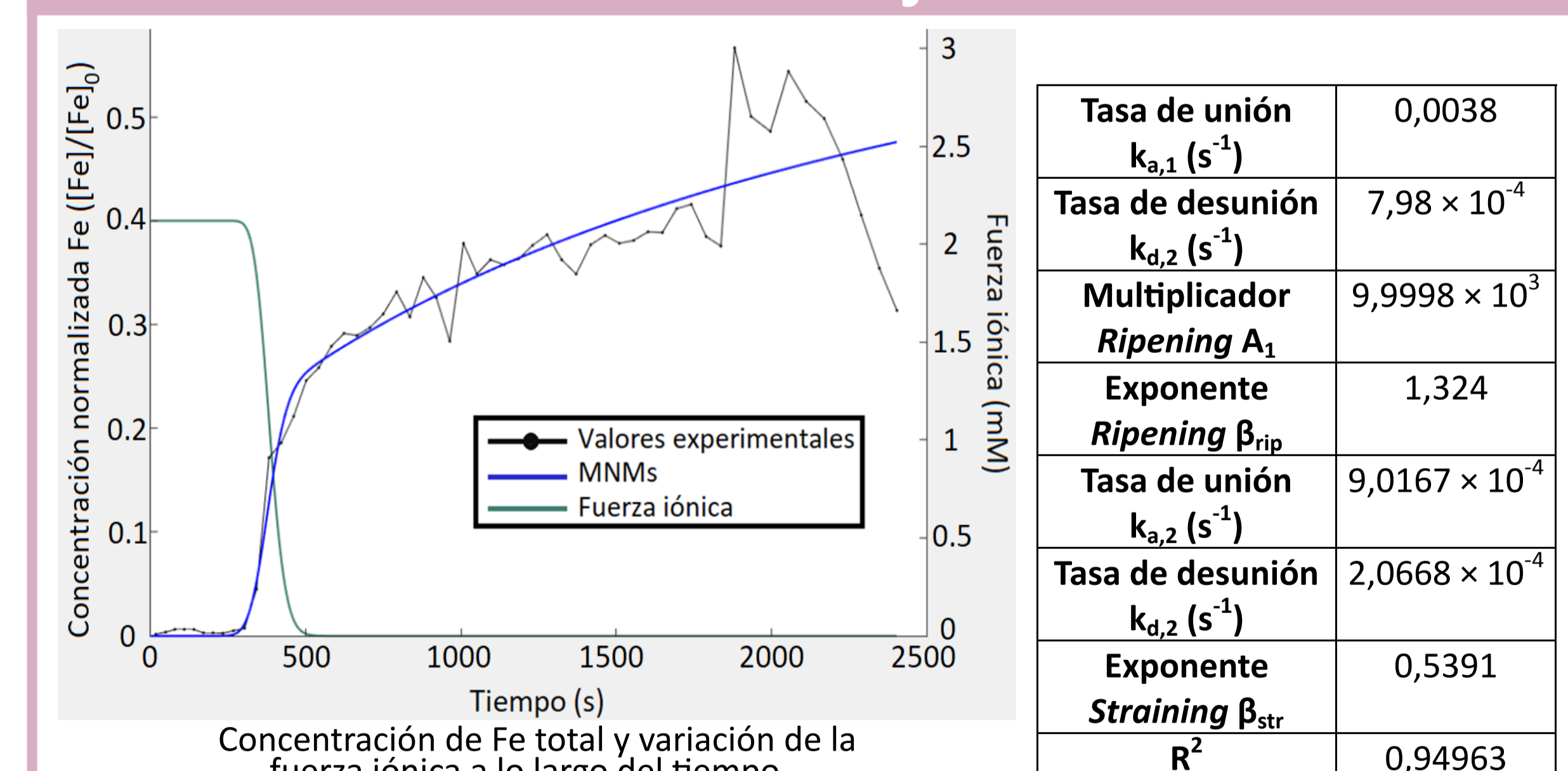
Concentración de NaCl a lo largo del tiempo, para las columnas de escala laboratorio (izquierda) y escala piloto (derecha).

	Escala Laboratorio	Escala Piloto
Porosidad teórica (-)	0,3293	0,3596
Porosidad MNMs (-)	0,3000	0,3800
Dispersividad (m)	0,0883	0,0033
R <sup>2</sup>	0,99592	0,99961

	Escala Laboratorio	Escala Piloto
Masa NaCl entrada (g)	0,0600	7,8000
Masa NaCl salida (g)	0,0642	8,2018
Error (%)	6,9869	5,1510

- Las variables de flujo obtenidas con MNMs ajustan las mediciones experimentales de forma satisfactoria.
- Tanto las porosidades teóricas como las calculadas con MNMs son similares para escalas laboratorio y piloto.
- La dispersividad en laboratorio es 25 veces mayor a la estimada en escala piloto.
- Los errores en los balances de masa no superan el 10%.

### Curva de flujo NFs



- La regresión obtenida con MNMs ajusta la curva experimental satisfactoriamente.
- Se consideró fluido newtoniano sin *clogging*.
- Predominan fenómenos atractivos (*ripening*) y físicos (*straining*)<sup>[2]</sup>.
- Para corregir el balance de masa, se supuso sólo error en las mediciones.

Tasa de unión $k_{a,1}$ (s <sup>-1</sup> )	0,0038
Tasa de desunión $k_{d,2}$ (s <sup>-1</sup> )	$7,98 \times 10^{-4}$
Multiplicador <i>Ripening</i> $A_1$	$9,9998 \times 10^3$
Exponente <i>Ripening</i> $\beta_{rip}$	1,324
Tasa de unión $k_{a,2}$ (s <sup>-1</sup> )	$9,0167 \times 10^{-4}$
Tasa de desunión $k_{d,2}$ (s <sup>-1</sup> )	$2,0668 \times 10^{-4}$
Exponente <i>Straining</i> $\beta_{str}$	0,5391
R <sup>2</sup>	0,94963

Masa Fe entrada (g)	0,5500
Masa Fe salida (g)	0,2275
Error (%)	58,6430

## Conclusiones

A través del uso de *software* computacional se lograron discernir no sólo los fenómenos intervinientes en el flujo de NFs a través de un lecho poroso, sino además sus variables características, minimizando el número de ensayos experimentales. Para caracterizar mejor el flujo de NFs, se debería efectuar un análisis reológico de la muestra para que el programa pueda predecir de forma más precisa el flujo en 1D, conociendo las propiedades reológicas del fluido.

## Referencias

- [1] A. Tiraferri y col., Environ. Sci. Technol. (2009), 43, 4425–4431
- [2] T. Tosco y col., Environ. Sci. Technol. (2010), 44, 9062–9068.
- [3] A. Tiraferri y col., Environ. Earth Sci. (2011), 63, 847–859.

## Reconocimiento

Este trabajo fue financiado mediante los proyectos PID UTN MSINNBA0004604, PICT 2013–2450, PICT 2018-3114 y FITS N° 01/2013.