

## ESTUDIO ACÚSTICO DE REACTORES QUÍMICOS ULTRASÓNICOS

**Referencia PACS: 43.35.Zc**

Autores: Ramis, Jaime<sup>2</sup>; Poveda, Pedro<sup>2</sup>; Bonete Pedro<sup>1</sup>; Lana-Villarreal Teresa<sup>1</sup>; Navarro, Francisco J. <sup>1</sup>; Ruíz-Femenía, Rubén <sup>3</sup>; Verónica Sáeza<sup>3</sup>; Roberto Gómez-Torregrosa<sup>1</sup>.

Institución: <sup>1</sup> Dpto. de Química Física e IU de Electroquímica, <sup>2</sup> Dpto. de Física, Ingeniería de Sistemas y Teoría de la Señal, <sup>3</sup> Dpto de Ingeniería Química, Universidad de Alicante.  
Universidad de Alicante, Ap. Correos 99, 03080 Alicante, Spain  
E-Mail: jramis@ua.es.

### RESUMEN

La industria química está incorporando cada vez más, ultrasonidos en sus procesos. La posibilidad de controlar las variaciones de presión mediante un campo acústico, ofrece grandes ventajas desde el punto de vista químico, actuando como catalizador de reacciones, y desde el punto de vista productivo, evitando la formación de depósitos sólidos que puedan ocasionar desperfectos en los equipos. En este trabajo se analizará, mediante la simulación a través de elementos finitos, el comportamiento en diferentes modelos de reactores químicos, poniendo de manifiesto la importancia de un adecuado diseño

### ABSTRACT

The chemical industry is increasingly incorporating, ultrasonic processes. The possibility of controlling the pressure variations by an acoustic field, offers great advantages from the standpoint of chemical catalyzing reactions and, and from the production point of view, avoiding the formation of solid deposits that may cause damage to the equipment. In this paper we analyze, through simulation by finite element behavior in different models of chemical reactors, highlighting the importance of good design.

## 1. INTRODUCCIÓN PLANTEAMIENTO

En este trabajo se presentan algunos de los resultados más significativos de diferentes modelos en elementos finitos de reactores químicos que utilizan los ultrasonidos como catalizadores en las reacciones. Como es sabido, la industria química está incorporando cada vez más esta técnica [1,2, 3 y 4] ya que la posibilidad de controlar las variaciones de presión mediante un campo acústico ofrece grandes ventajas, actuando como catalizador de reacciones, evitando la formación de depósitos sólidos que puedan ocasionar desperfectos en los equipos, etc.

Los reactores cuyos modelos se han implementado se han recogido de la literatura sobre el tema y se han recogido de las referencias [1,4].

Al tratarse de un trabajo con una vertiente académica, el formato se aparta del convencional utilizado en comunicaciones a congresos. Por esta razón no se aportan gran cantidad de datos sobre las simulaciones. No obstante cualquier lector interesado puede consultar a los autores del trabajo para cualquier cuestión concreta sobre los modelos. Consta de una primera sección en la que se plantean los objetivos, un segundo apartado en el que se describen los transductores piezoeléctricos que son los generadores ultrasónicos de baja frecuencia más usados, una tercera sección en la que se revisan los distintos tipos de reactores y se describen los modelos numéricos implementados junto con algunos resultados de interés. Por último, en el apartado de conclusiones, se resumen los aspectos más significativos.

## 2. TRANSDUCTORES PIEZOELÉCTRICOS.

Aunque hay transductores ultrasónicos piezoeléctricos, electrostáticos y magnetostrictivos, los más utilizados en el ámbito que nos ocupa son los primeros. Concretamente, cuando se trata de radiar gran potencia en el rango por debajo de los 200 kHz, la estructura tipo sándwich o Langevin es la más usual. Los fundamentos del diseño de estos transductores se puede consultar en manuales y publicaciones conocidas [5,6] siendo ampliamente utilizados los modelos simplificados KLM y Mason [7]. En la figura 1 se muestra un transductor elemental de este tipo en el que se distinguen claramente los dos elementos activos, que en este caso son PZT 8 [ 8 ], en la parte central.



Figura 1. Transductor piezoeléctrico tipo Sándwich (Langevin) en el que se aprecian los dos elementos activos (en este caso PZT 8), la parte delantera de aluminio, la trasera de latón y la cabeza del tornillo de ajuste.

El problema del diseño de este tipo de transductores consiste en determinar las longitudes de la parte delantera y trasera para optimizar la transmisión hacia delante a la frecuencia de diseño. Se puede optar, en función de la potencia necesaria, por dos, cuatro o más elementos activos. La optimización para la radiación en un campo confinado depende de la aplicación concreta.

### 3. REACTORES QUÍMICOS Y ULTRASONIDOS

En esta sección se hace una revisión de algunas geometrías encontrada en la literatura para los reactores químicos con apoyo ultrasónico. En todos los caso, el problema es el mismo: la perturbación generada por el transductor se propaga en un medio en el que se está produciendo una reacción o proceso que se acelera o activa debido a la energía recibida. Desde el punto de vista acústico los parámetros relevantes son la frecuencia de diseño y, si el medio en el que se lleva a cabo la reacción está confinado, la uniformidad del campo acústico para la frecuencia de diseño.

Una de las opciones más simples es la que se muestra en la figura 2, en la que se puede apreciar el transductor con dos elementos PZT-8[7], que irradia en una zona concreta del espacio por la que pudiera pasar un caudal de líquido. A la izquierda se visualiza el campo acústico para la frecuencia de 16450 Hz y a la derecha para 19850 Hz. El campo acústico es mucho más homogéneo para esta segunda.

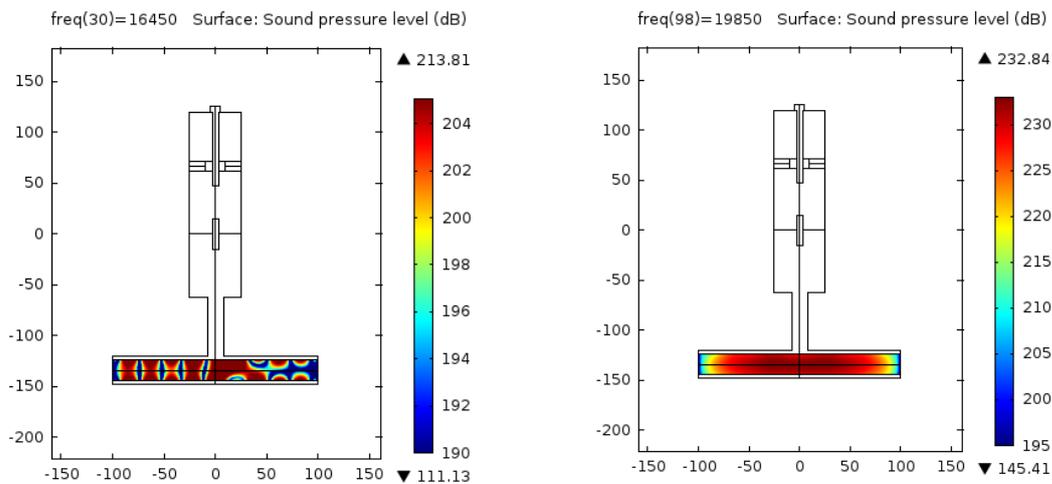


Figura 2. Izda. Distribución del nivel de presión sonora para la frecuencia de 16450 Hz. Derecha: Idem para 19850 Hz

En la figura 3 Izda se presentan la media espacial a lo largo del eje longitudinal de los niveles máximos, mínimo y medio en función de la frecuencia y la figura 3 Dcha, el nivel de presión sonora a lo largo del eje longitudinal para distintas frecuencias. La distribución más homogénea corresponde a la frecuencia de 19850 Hz

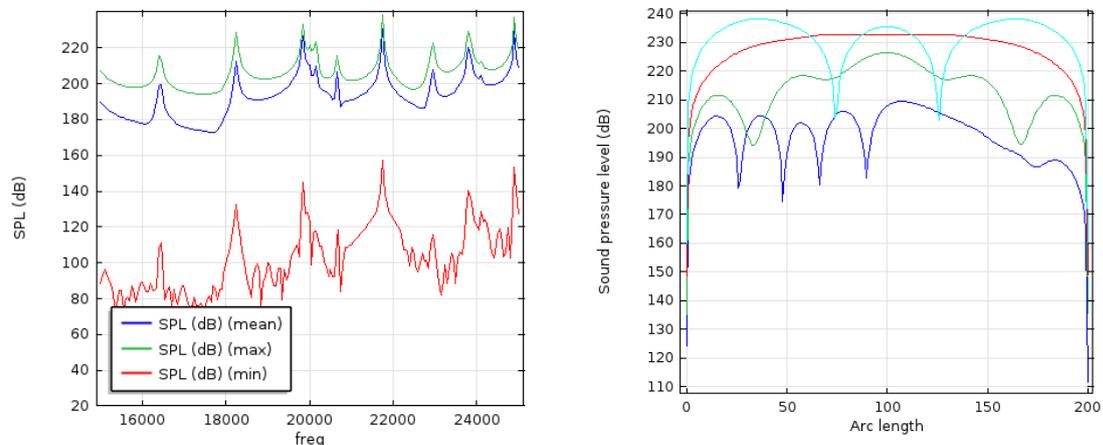


Figura 3. Izquierda : Media espacial a lo largo del eje longitudinal de los niveles de presión sonora máximo, mínimo y medio en función de la frecuencia. Derecha: Niveles de presión sonora a lo largo del eje longitudinal del reactor para distintas frecuencias. El color rojo corresponde a 19850 Hz para la que el campo es más homogéneo.

Si se desea aumentar la zona de influencia de la radiación ultrasónica o bien el tiempo de exposición, se puede recurrir a la solución que se muestra en la figura 4 en la que hay dos transductores seguidos y en la que se muestra la distribución de nivel de presión sonora para dos frecuencias (Izda y Dcha), de forma análoga a como se ha realizado en la figura 2.

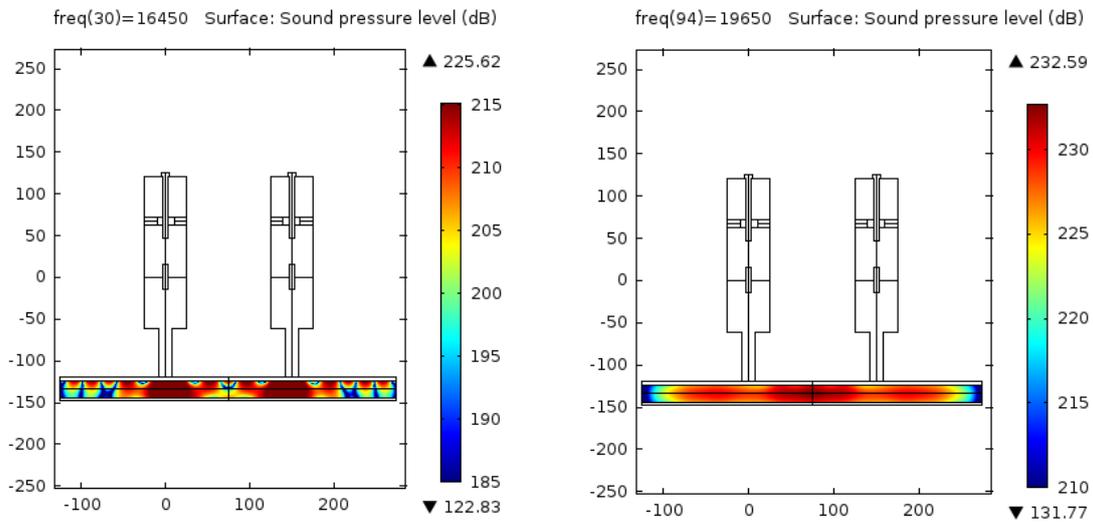


Figura 4. Reactor con dos transductores (en serie) . Izda. Distribución del nivel de presión sonora para la frecuencia de 16450 Hz. Derecha: Idem para 19650 Hz

La figura 5 es análoga a la 3 pero aplicada al caso que nos ocupa. La figura de la derecha muestra claramente que para la frecuencia de 19650 Hz la uniformidad del campo acústico en la zona de interés es mayor

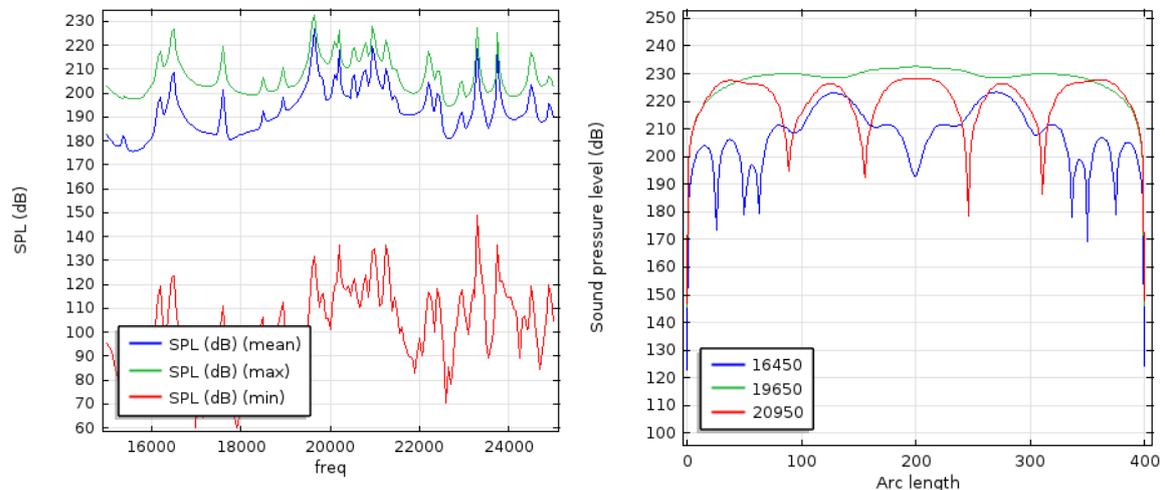


Figura 5. Reactor con dos transductores. Izda: Media espacial a lo largo del eje longitudinal de los niveles de presión sonora máximo, mínimo y medio en función de la frecuencia. Dcha: Niveles de presión sonora a lo largo del eje longitudinal del reactor

Aumentando el nivel de complicación, nos encontramos con el caso en el que la zona a irradiar, en la que se produce la reacción, es un recinto con que no tiene una dimensión privilegiada y se producen modos en las tres direcciones del espacio (axiales, tangenciales y oblicuos). Si la reacción se favorece con un campo homogéneo habrá que considerar de entrada una adecuada elección de la geometría. En la figura 6 se muestran resultados de simulaciones correspondientes a un reactor con un solo transductor. La figuras a, b y c corresponden a las distribuciones de nivel de presión sonora para tres frecuencias. La figura d corresponde a la media espacial de los niveles máximo, mínimo y medio en función de la frecuencia

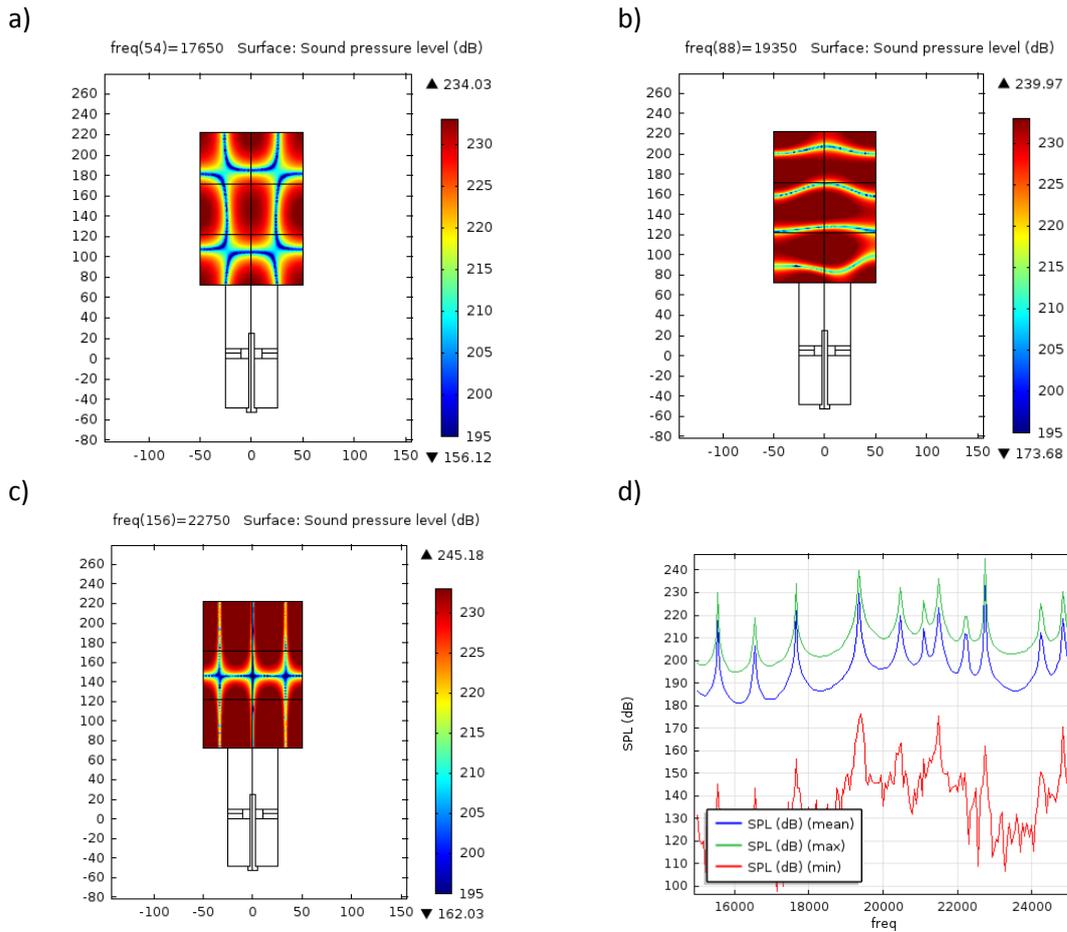


Figura 6. Reactor con transductor radiando en un campo confinado .a, b y c corresponden a las distribuciones de nivel de presión sonora para tres frecuencias. La figura d corresponde a la media espacial de los niveles máximo, mínimo y medio en función de la frecuencia

En la figuras 7 se presenta un reactor con una filosofía distinta. En este caso, el elemento activo piezoeléctrico, hace vibrar una placa sobre la que también se encuentra el reactor propiamente dicho. La dificultad para implementar el modelo numérico de este tipo de reactores –y, por supuesto construirlos- es mayor ya que las condiciones de contorno son menos evidentes. En la figura de la izquierda se muestra un plano general y en la de la derecha un plano de detalle

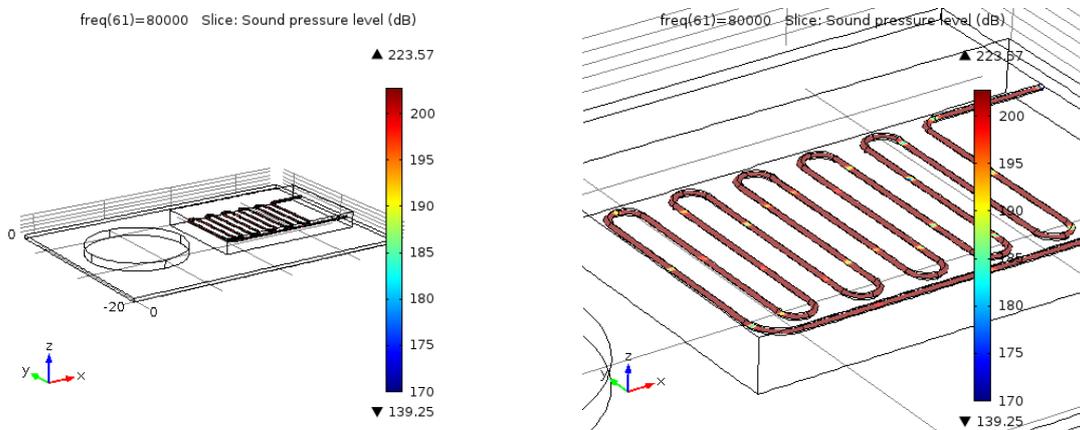


Figura 7. Reactor químico en el que el elemento activo piezoeléctrico, hace vibrar una placa sobre la que también se encuentra el reactor propiamente dicho. Izquierda: Plano general. Dcha: Plano de detalle

Con el objeto de destacar la importancia de un estudio profundo de la interrelación entre todas las variables, en la figura 8 se muestra el efecto de variar la distancia entre el elemento piezoeléctrico y el reactor (de 1 a 9 mm en incrementos de 2 mm). En cada una de las gráficas se representa el nivel de presión sonora en función de la frecuencia. El máximo nivel de presión sonora se ha marcado con una señal de color rojo. Se puede apreciar que el máximo se desplaza al variar la distancia.

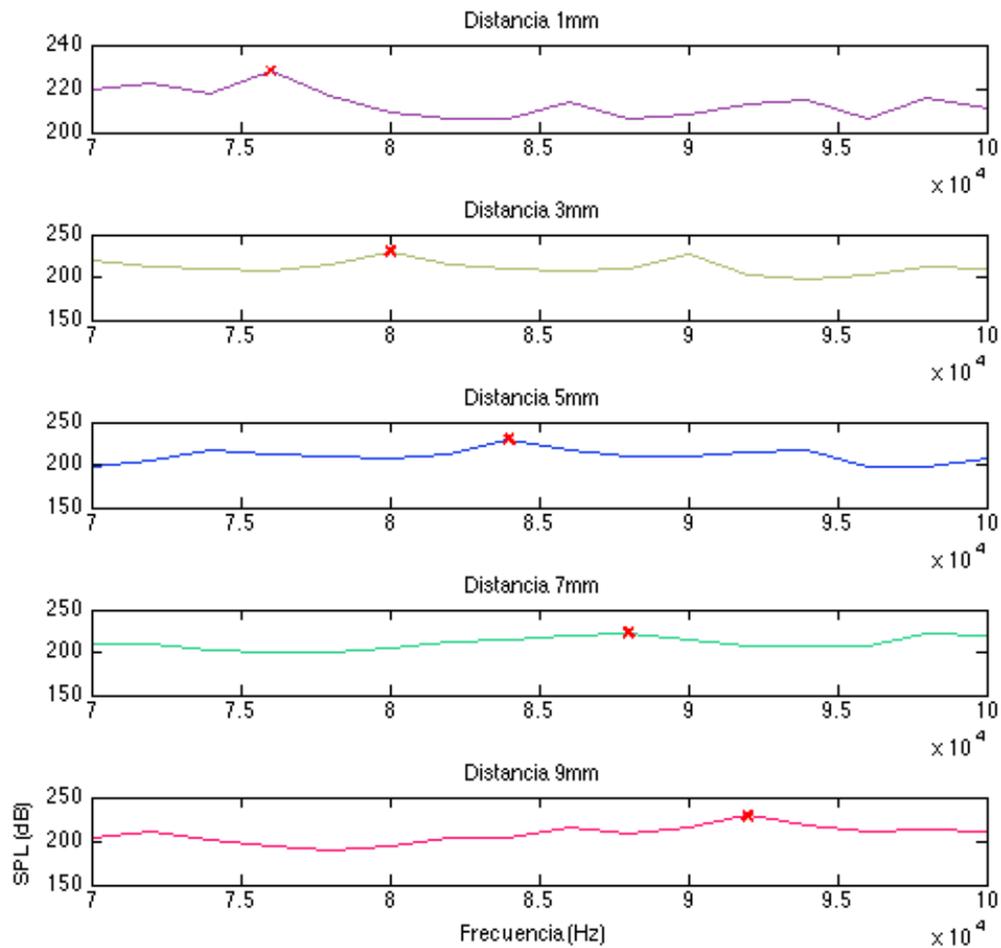


Figura 8. Nivel de presión sonora en función de la frecuencia para diferentes distancias entre el elemento piezoeléctrico y el reactor (de 1 a 9 mm en incrementos de 2 mm). El máximo de nivel de presión sonora se ha marcado con una señal de color rojo.

Continuando con el aumento del nivel de complejidad, nos encontramos con la configuración de las figuras 9 en la que cuatro elementos activos comunican la vibración a una placa que es solidaria con el reactor. En este caso, nos encontramos con cuatro fuentes sonoras extensas que superponen su contribución: la complejidad del problema es mayor y la ubicación óptima del reactor debe ser objeto de un minucioso estudio ya que dependiendo de la frecuencia encontraremos máximos o mínimos en diferentes puntos de la zona de interés.

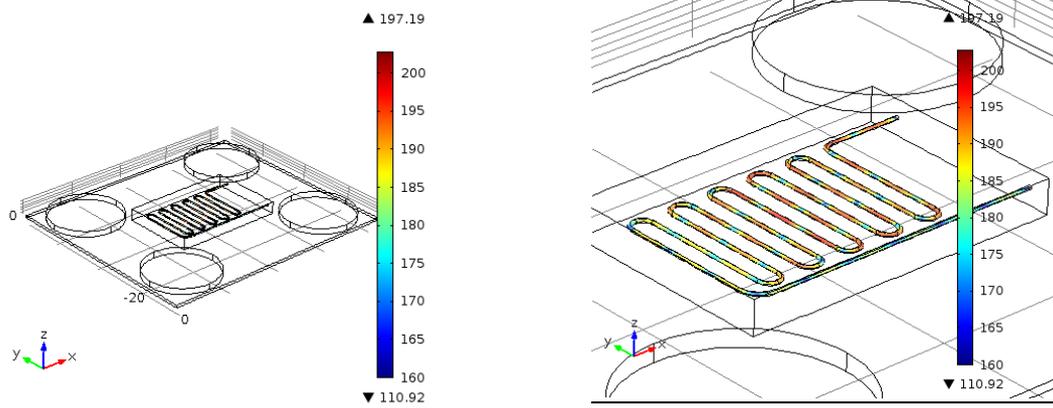


Figura 10. Reactor químico con cuatro elementos piezoeléctrico activos que comunican su vibración a la placa en la que se encuentra también el reactor.

Por último, en la figura 11 se muestra un microreactor [ 8 ]. En este caso, el elemento activo es de nuevo, un PZT-5-A [7]. Cada una de las capas juega un papel.

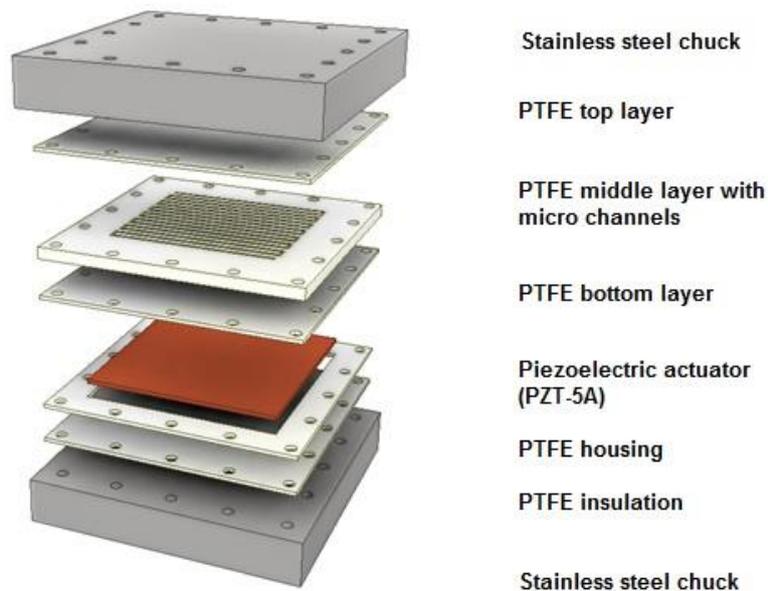


Figura 11. Microreactor ultrasónico utilizado en [ 8 ]

En la figura 12 se muestran dos resultados del modelo numérico en FEM. A la izquierda se representa el nivel de presión sonora en función de la frecuencia. Como se puede apreciar alrededor de 53 kHz se alcanza un máximo. Para esta frecuencia se ha representado a la derecha el desplazamiento correspondiente al campo acústico

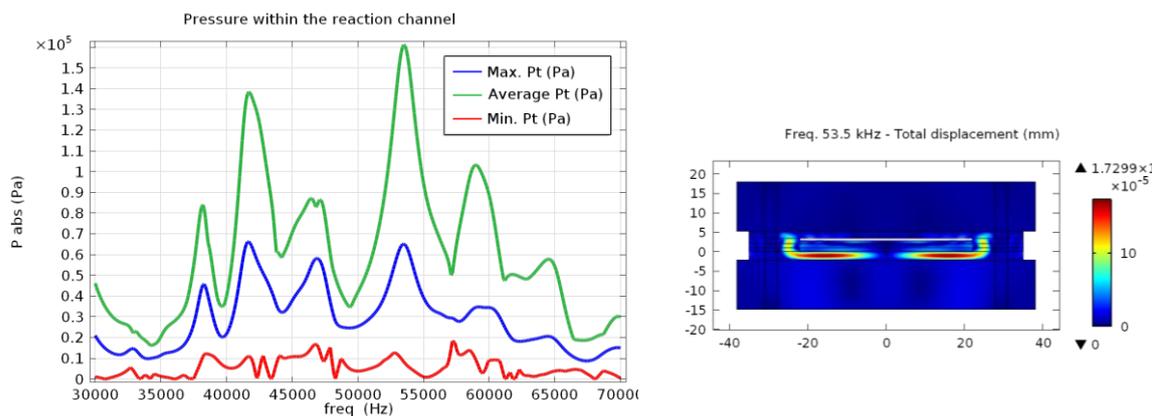


Figura 12. Izda: SPL en función de la frecuencia para el microreactor de la figura 11. Dcha: Campo de desplazamientos para la frecuencia de 53.5 kHz (que corresponde a un máximo de SPL)

#### 4. CONCLUSIONES

Se han presentado algunos resultados significativos de modelos en elementos finitos de reactores químicos que utilizan los ultrasonidos como catalizadores/activadores en estos dispositivos.

#### AGRADECIMIENTOS

This research is kindly funded by the EU project MAPSYN: Microwave, Acoustic and Plasma SYNtheses, under grant agreement No. CP-IP 309376 of the European Community's Seventh Framework Program.

#### REFERENCIAS

- [1] Fernandez Rivas, D., Cintas, P. & Gardeniers, H.J.G.E., 2012. Merging microfluidics and sonochemistry: towards greener and more efficient micro-sono-reactors. *Chemical communications* (Cambridge, England), 48(89), pp.10935–47. Available at: <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/23001310> [Accessed May 22, 2013].
- [2] Louisnard, O. et al., 2009. FEM simulation of a sono-reactor accounting for vibrations of the boundaries. *Ultrasonics Sonochemistry*, 16, pp.250–259.
- [3] Hessel, V. et al., 2013. Industrial applications of plasma, microwave and ultrasound techniques: Nitrogen-fixation and hydrogenation reactions. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*. Available at: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0255270113000391> [Accessed March 13, 2013].
- [4] Piotr Vasiljev et Al; Piezomechanical Systems for Algae Cell Ultrasonication; World Academy of Science, Engineering and Technology 74; 2013
- [5] Kinsler L.; Fundamentals of acoustics, Ed. Wiley, (1995)
- [6] Kuttuff H; Ultrasonics. Fundamentals and applications; Elsevier Applied Science (1991)
- [7] [http://www.morganelectroceramics.com/resources/technical-publications/\(acceso](http://www.morganelectroceramics.com/resources/technical-publications/(acceso) 27/08/2013).
- [8] Kuhn, S. et al., 2011. A Teflon microreactor with integrated piezoelectric actuator to handle solid forming reactions. *Lab on a chip*, 11(15), pp.2488–92. Available at: <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/21701722> [Accessed May 30, 2013].