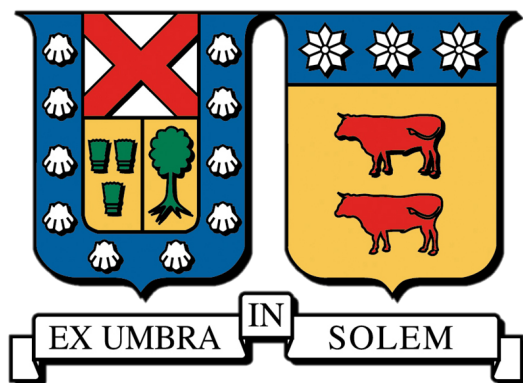


**UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARÍA**

DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA Y AMBIENTAL



CAPTURA DIRECTA DE CO<sub>2</sub> DEL AIRE MEDIANTE  
PELLETS MONOLÍTICOS DE CARBÓN ACTIVADO  
EN UN SISTEMA VSA A ESCALA DOMÉSTICA

**GUILLERMO SEGUNDO CÓRDOVA CASTILLO**

TESIS PARA OPTAR A MAGÍSTER EN CIENCIAS DE LA INGENIERÍA QUÍMICA

PROFESOR GUÍA: DR. IVÁN CORNEJO GARCÍA  
PROFESORES CO-REFERENTES: DR. GONZALO NUÑEZ MONTOYA  
DR. ROBERTO CANALES MUÑOZ  
MSc. CONSUELO REINAO FISHER

JUNIO - 2026



## CONSTANCIA DE VALIDACIÓN Y CONFIDENCIALIDAD DE MONOGRAFÍA A REPOSITORIO ACADÉMICO

### 1.- IDENTIFICACIÓN DEL TRABAJO ACADÉMICO

**Tipo de monografía (marcar una opción):** ☐ Memoria o trabajo de título ☒ Tesis de Postgrado

**Título del trabajo:** CAPTURA DIRECTA DE CO2 DEL AIRE MEDIANTE PELLETS MONOLÍTICOS DE CARBÓN ACTIVADO EN UN SISTEMA VSA A ESCALA DOMÉSTICA

**Nombre del candidato(a):** Guillermo Segundo Córdova Castillo

**Carrera / Grado:** Magíster en Ciencias de la Ingeniería Química

**Campus:** Casa Central **Departamento:** Ingeniería Química y Ambiental

### 2.- VALIDACIÓN DEL PROFESOR GUÍA/DIRECTOR DE TESIS

Yo, Ivan Andres Cornejo Garcia, en mi calidad de profesor(a) guía/director(a) del trabajo académico mencionado anteriormente **DEJO CONSTANCIA** que:

- He revisado esta versión del documento y corresponde a la versión final aprobada del trabajo.
- El trabajo cumple con los requisitos académicos y de formato establecidos por la institución.

### 3.- EVALUACIÓN DE CONFIDENCIALIDAD POR PROPIEDAD INDUSTRIAL (marcar una opción)

☒ El trabajo **NO contiene** información que amerite confidencialidad y puede ser publicado de inmediato en repositorio con acceso abierto.

☐ El trabajo **CONTIENE** información con potenciales implicancias de propiedad industrial o intelectual y requiere un periodo de confidencialidad (**embargo**) por (**marcar una opción**):

☐ 6 meses ☐ 12 meses ☐ 2 años ☐ 3 años ☐ 5 años ☐ 10 años

**Fundamentación de la necesidad de confidencialidad (obligatorio si se solicita embargo):**

---

---

---

### 4.- FIRMAS

**Profesor(a) guía o director(a) de memoria o tesis:**

**Fecha:** 12-08-2026

**Firma:** Iván Andrés Cornejo García

Firmado digitalmente por  
Iván Andrés Cornejo García  
Fecha: 2026.08.12 10:40:42  
+04'00'

**Estudiante o Candidato(a):**

**Fecha:** 12-08-2026

**Firma:**

*Este formulario debe ser insertado como página 2 de la memoria o tesis, completado y firmado por estudiante y profesor(a) antes de la entrega en portal PRISMA de Biblioteca USM.*

# Resumen

La problemática climática actual, originada principalmente por actividades antropogénicas, provoca un aumento sostenido de las concentraciones atmosféricas de  $\text{CO}_2$ , intensificando el calentamiento global. En este contexto, la Captura Directa del Aire (DAC) surge como una tecnología clave para mitigar emisiones. Dentro de las alternativas DAC, la adsorción física en sólidos destaca por su menor requerimiento energético y su potencial de escalabilidad, posicionando al carbón activado como un adsorbente atractivo debido a su bajo costo y alta microporosidad.

Este trabajo evalúa la influencia de la morfología geométrica interna de pellets con forma monolítica de carbón activado sobre su desempeño en la captura directa de  $\text{CO}_2$  bajo condiciones ambientales relevantes. Para ello, se diseña y construye un sistema experimental en modo batch, operado mediante ciclos de adsorción, que permite comparar pellets monolíticos moldeados manualmente con carbón activado granular convencional. Se analizan distintos diseños geométricos variando el tamaño de canal y el espesor de pared, evaluando su capacidad de adsorción.

Los resultados muestran que los pellets monolíticos superan ampliamente al carbón granular, alcanzando capacidades de adsorción entre 70 y 150  $\text{mg CO}_2/\text{kg CA}$ , frente a valores inferiores a 40  $\text{mg CO}_2/\text{kg CA}$  para el material granular. La reducción del espesor de pared desde 7 mm a 5 mm genera incrementos de captura del orden de 25–40%, asociados a una menor resistencia difusiva y a un aumento de la relación área/volumen cercano al 40%. El diseño 4 mm/4 mm presenta la mayor capacidad de adsorción y una superficie efectiva de contacto de  $0.0603 \text{ m}^2$ , superior a otros diseños.

Desde el punto de vista económico, este diseño también se posiciona como el más competitivo, ya que presenta el menor CAPEX, OPEX y costo nivelado de captura (LCOC), con un valor aproximado de 6.040 USD/t $\text{CO}_2$ . Esto representa una reducción cercana a 2.917 USD/t $\text{CO}_2$  respecto al sistema basado en carbón activado granular, esto corresponde a un ahorro acumulado del orden de 7.51 millones de USD durante la vida útil del proyecto. La caracterización textural confirma una microporosidad dominante favorable para la adsorción física a bajas presiones parciales y un pH de punto de carga cero cercano a 8.43, indicando una superficie básica favorable para la interacción con  $\text{CO}_2$ . Los resultados demuestran que la optimización geométrica de adsorbentes estructurados permite mejorar la eficiencia y viabilidad económica de sistemas DAC basados en carbón activado.

# Abstract

The current climate crisis, primarily driven by anthropogenic activities, leads to a continuous increase in atmospheric CO<sub>2</sub> concentrations, intensifying global warming. In this context, Direct Air Capture (DAC) emerges as a key technology to mitigate emissions. Among DAC alternatives, physical adsorption on solid materials stands out due to its lower energy requirements and scalability potential, positioning activated carbon as an attractive adsorbent due to its low cost and high microporosity.

This work evaluates the influence of the internal geometric morphology of monolithic activated carbon pellets on their performance in direct CO<sub>2</sub> capture under relevant environmental conditions. For this purpose, a batch-mode experimental system is designed and constructed, operated through adsorption cycles, allowing the comparison between manually molded monolithic pellets and conventional granular activated carbon. Different geometric designs are analyzed by varying channel size and wall thickness, evaluating their adsorption capacity.

The results show that monolithic pellets significantly outperform granular carbon, achieving adsorption capacities between 70 and 150 mg CO<sub>2</sub>/kg CA, compared to values below 40 mg CO<sub>2</sub>/kg CA for the granular material. Reducing the wall thickness from 7 mm to 5 mm leads to capture increases on the order of 25–40%, associated with lower diffusive resistance and an increase in the area-to-volume ratio of approximately 40%. The 4 mm/4 mm design presents the highest adsorption capacity and an effective contact surface area of 0.0603 m<sup>2</sup>, higher than other designs.

From an economic perspective, this design also stands out as the most competitive, as it presents the lowest CAPEX, OPEX, and levelized cost of capture (LCOC), with an approximate value of 6.040 USD/tCO<sub>2</sub>. This represents a reduction of about 2.917 USD/tCO<sub>2</sub> compared to the system based on granular activated carbon, corresponding to an accumulated savings on the order of 7.51 million USD over the project lifetime. Textural characterization confirms a dominant microporosity favorable for physical adsorption at low partial pressures and a point of zero charge pH close to 8.43, indicating a basic surface favorable for interaction with CO<sub>2</sub>. The results demonstrate that the geometric optimization of structured adsorbents improves both the efficiency and economic viability of DAC systems based on activated carbon.

# Agradecimientos

Debo agradecer primero, a mi familia por todo el apoyo entregado en esta última etapa universitaria, la de terminar un grado académico superior, una misión que partió con inseguridad, indecisión y miedo de saber si es que fue la mejor decisión. Pero esta meta fue siempre con la convicción de aprender, de adquirir habilidades y experiencias que con solo el pregrado no eran suficientes: Esta experiencia me enseñó sobre resiliencia y perseverancia, me enseñó que la investigación I+D tiene mucho por entregar a nuestro país, pero que no es fácil, no todo sale como uno quiere ni cuando quiere, fueron meses de sacrificio, de venir todos los días a ingeniárselas como uno pueda. Además de aprender a prueba y error como trabajar de manera profesional en laboratorio. Estoy enormemente agradecido de los apoyos académicos que me apoyaron en la elaboración de este trabajo, por entregarme las herramientas necesarias y enseñarme que no es fácil el camino, que en el corto plazo no me dará garantía de tener la mejor oportunidad laboral, pero tengo la convicción que esta decisión que me abrirá muchas puertas para el futuro, de añadir capital humano a mi perfil y enfrentarme a los principales desafíos de la nación, siempre con una metodología de investigación presente en todo. Agradezco también a mis amigos, tanto yo como ellos saben que no fue fácil, fue un camino de mucho esfuerzo y sacrificio, de dejar atrás varios prejuicios, y tomar el riesgo. También agradezco a mi equipo de cheerleader "Cheetahs USM", nunca es tarde para aprender un nuevo deporte, agradezco la energía del equipo y abrirme las puertas para seguir desarrollando este fantástico deporte. Menciono la disposición de Amaya Oteiza de ayudarme en el registro y elaboración de los pellets monolitos, momento por el cual aprendimos bastante, agradezco al proyecto ANID R23F0001 de CICITEM, por el financiamiento de este proyecto, de Iván Cornejo y Gonzálo Núñez por el apoyo constante, por la asistencia a los congresos. Solo al arriesgarnos podemos hacer que nuestras vidas mejoren. Seguí avanzando incluso cuando no podía ver el camino, porque detenerme nunca fue una opción.

# Tabla de Contenidos

|          |                                                                               |          |
|----------|-------------------------------------------------------------------------------|----------|
| <b>1</b> | <b>Introducción</b>                                                           | <b>1</b> |
| <b>2</b> | <b>Objetivos y Alcances</b>                                                   | <b>6</b> |
| 2.1      | Objetivo General . . . . .                                                    | 6        |
| 2.2      | Objetivos Específicos . . . . .                                               | 6        |
| 2.3      | Hipótesis . . . . .                                                           | 7        |
| 2.4      | Alcances . . . . .                                                            | 7        |
| <b>3</b> | <b>Marco Teórico</b>                                                          | <b>8</b> |
| 3.1      | Captura Directa del Aire . . . . .                                            | 8        |
| 3.1.1    | Tecnologías disponibles . . . . .                                             | 9        |
| 3.2      | Materiales adsorbentes para la captura de carbono . . . . .                   | 11       |
| 3.2.1    | Carbón activado como adsorbente . . . . .                                     | 13       |
| 3.3      | Métodos de Adsorción Industrial . . . . .                                     | 15       |
| 3.3.1    | Adsorción por oscilación de temperatura (TSA) . . . . .                       | 15       |
| 3.3.2    | Adsorción por oscilación de presión (PSA) . . . . .                           | 17       |
| 3.3.3    | Adsorción por oscilación al vacío (VSA) . . . . .                             | 18       |
| 3.3.4    | Adsorción por oscilación de temperatura al vacío (TVSA) . . . . .             | 19       |
| 3.4      | Fundamentos de Adsorción de CO <sub>2</sub> en Carbón Activado . . . . .      | 20       |
| 3.4.1    | Principios de adsorción . . . . .                                             | 20       |
| 3.4.2    | Características físicoquímicas del carbón activado . . . . .                  | 20       |
| 3.4.3    | Carbón activado de cáscara de coco . . . . .                                  | 23       |
| 3.5      | Caracterización Física del Carbón Activado . . . . .                          | 25       |
| 3.5.1    | Caracterización textural mediante adsorción de N <sub>2</sub> (BET) . . . . . | 25       |
| 3.5.2    | Isotermas de adsorción . . . . .                                              | 26       |
| 3.5.3    | Curvas de ruptura . . . . .                                                   | 30       |
| 3.5.4    | pH de carga cero . . . . .                                                    | 32       |
| 3.6      | Pellets Monolíticos para Adsorción de CO <sub>2</sub> . . . . .               | 33       |

|          |                                                                                 |           |
|----------|---------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>4</b> | <b>Diseño Experimental</b>                                                      | <b>39</b> |
| 4.1      | Variables de Proceso . . . . .                                                  | 39        |
| 4.2      | Diseño Experimental . . . . .                                                   | 42        |
| <b>5</b> | <b>Materiales y Métodos</b>                                                     | <b>45</b> |
| 5.1      | Equipos y Materiales . . . . .                                                  | 45        |
| 5.2      | Montaje Experimental . . . . .                                                  | 47        |
| 5.2.1    | Operación del dispositivo . . . . .                                             | 49        |
| 5.2.2    | Sensor de CO <sub>2</sub> . . . . .                                             | 50        |
| 5.3      | Elaboración de Pellets Monolíticos . . . . .                                    | 52        |
| 5.3.1    | Preparación del carbón activado . . . . .                                       | 52        |
| 5.3.2    | Preparación del medio líquido y disolución del aglutinante . . . . .            | 53        |
| 5.3.3    | Incorporación del carbón activado . . . . .                                     | 53        |
| 5.3.4    | Secado . . . . .                                                                | 54        |
| 5.3.5    | Tratamiento térmico . . . . .                                                   | 55        |
| 5.4      | Caracterización Física del Carbón Activado . . . . .                            | 56        |
| 5.5      | Caracterización Textural del Carbón Activado . . . . .                          | 58        |
| 5.6      | pH Carga 0 . . . . .                                                            | 61        |
| 5.7      | Determinación de la Capacidad de Adsorción . . . . .                            | 64        |
| <b>6</b> | <b>Resultados</b>                                                               | <b>66</b> |
| 6.1      | Rendimiento entre Morfología Monolítica y Granular . . . . .                    | 66        |
| 6.2      | Influencia del Espesor de Pared y Tamaño de Canal . . . . .                     | 69        |
| 6.2.1    | Influencia del espesor de pared . . . . .                                       | 69        |
| 6.2.2    | Influencia del tamaño de canal . . . . .                                        | 70        |
| 6.3      | Influencia de la Geometría Interna en la Capacidad de Adsorción . . . . .       | 72        |
| 6.3.1    | Efecto de la densidad de celda . . . . .                                        | 72        |
| 6.3.2    | Efecto del área superficial por volumen . . . . .                               | 73        |
| 6.4      | Análisis de Morfología Interna con Mayor Área Superficial por Volumen . . . . . | 74        |
| 6.4.1    | Diseño experimental . . . . .                                                   | 75        |
| 6.4.2    | Influencia del área superficial por volumen a misma densidad de celda . . . . . | 76        |
| 6.4.3    | Rendimiento del diseño con mayor área superficial por volumen . . . . .         | 78        |
| 6.5      | Influencia de la Temperatura y Humedad . . . . .                                | 82        |
| 6.6      | Análisis Técnico Económico . . . . .                                            | 84        |
| 6.6.1    | Diagrama de procesos . . . . .                                                  | 85        |
| 6.6.2    | Capacidad de captura . . . . .                                                  | 86        |
| 6.6.3    | Dimensionamiento . . . . .                                                      | 87        |

|          |                                                                                          |            |
|----------|------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| 6.6.4    | Escalamiento . . . . .                                                                   | 89         |
| 6.6.5    | CAPEX . . . . .                                                                          | 89         |
| 6.6.6    | OPEX . . . . .                                                                           | 91         |
| 6.6.7    | Costo nivelado de captura (LCOC) . . . . .                                               | 93         |
| 6.6.8    | Análisis de sensibilidad económica . . . . .                                             | 96         |
| 6.7      | Caracterización Textural . . . . .                                                       | 98         |
| 6.8      | Determinación del pH Carga 0 . . . . .                                                   | 99         |
| 6.9      | Evaluación del carbón activado para aplicación en DAC . . . . .                          | 102        |
| <b>7</b> | <b>Conclusiones y Recomendaciones</b>                                                    | <b>104</b> |
|          | <b>Referencias</b>                                                                       | <b>106</b> |
| <b>A</b> | <b>Dispositivo DAC</b>                                                                   | <b>I</b>   |
| <b>B</b> | <b>Isotermas de adsorción–desorción de N<sub>2</sub></b>                                 | <b>I</b>   |
| B.1      | Isoterma de adsorción–desorción de N <sub>2</sub> del carbón activado en polvo . . . . . | II         |
| B.2      | Isoterma de adsorción–desorción de N <sub>2</sub> del pellet diseño 4 . . . . .          | III        |
| B.3      | Isoterma de adsorción–desorción de N <sub>2</sub> del pellet diseño 5 . . . . .          | IV         |
| B.4      | Isoterma de adsorción–desorción de N <sub>2</sub> del pellet diseño 6 . . . . .          | V          |
| B.5      | Isoterma de adsorción–desorción de N <sub>2</sub> del pellet diseño 4 molido . . . . .   | VI         |
| <b>C</b> | <b>Análisis de microporosidad mediante método <i>t-plot</i></b>                          | <b>I</b>   |
| C.1      | Análisis <i>t-plot</i> de carbón activado en polvo . . . . .                             | II         |
| C.2      | Análisis <i>t-plot</i> del pellet diseño 4 . . . . .                                     | III        |
| C.3      | Análisis <i>t-plot</i> del pellet diseño 5 . . . . .                                     | IV         |
| C.4      | Análisis <i>t-plot</i> del pellet diseño 6 . . . . .                                     | V          |
| C.5      | Análisis <i>t-plot</i> del pellet diseño 4 molido . . . . .                              | VI         |
| <b>D</b> | <b>Distribución de tamaño de poro</b>                                                    | <b>I</b>   |
| D.1      | Distribución de tamaño de poro del carbón activado en polvo . . . . .                    | II         |
| D.2      | Distribución de tamaño de poro del del pellet diseño 4 . . . . .                         | III        |
| D.3      | Distribución de tamaño de poro del del pellet diseño 5 . . . . .                         | IV         |
| D.4      | Distribución de tamaño de poro del del pellet diseño 6 . . . . .                         | V          |
| D.5      | Distribución de tamaño de poro del del pellet diseño 4 molido . . . . .                  | VI         |

# Lista de Tablas

|     |                                                                                                                                                                       |    |
|-----|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 3.1 | Tecnologías existentes de captura de carbono directa de aire [14] . . . . .                                                                                           | 10 |
| 3.2 | Capacidad de adsorción de CO <sub>2</sub> para distintos carbones activados derivados de biomasa [23]. . . . .                                                        | 15 |
| 3.3 | Revisión bibliográfica de los métodos empleados en la preparación de carbón activado a partir de cáscara de coco (CC) [45]. . . . .                                   | 26 |
| 3.4 | Resumen de modelos de isothermas de adsorción y métodos de transferencia de masa para monolitos adsorbentes [58]. . . . .                                             | 28 |
| 4.1 | Listado de variables experimentales . . . . .                                                                                                                         | 40 |
| 4.2 | Diseño experimental por corrida . . . . .                                                                                                                             | 42 |
| 4.3 | Distribución de proporción entre CMC y CA másico. . . . .                                                                                                             | 43 |
| 4.4 | Parámetros morfológicos de los pellets monolíticos evaluados. . . . .                                                                                                 | 44 |
| 5.1 | Principales equipos y materiales utilizados en el desarrollo experimental . . . . .                                                                                   | 47 |
| 5.2 | Pines del sensor SCD30 y su función. . . . .                                                                                                                          | 50 |
| 5.3 | Propiedades físicas del carbón activado en polvo (ficha técnica del proveedor). . . . .                                                                               | 57 |
| 5.4 | Descripción de las muestras utilizadas en los análisis BET y masas empleadas en cada ensayo . . . . .                                                                 | 59 |
| 5.5 | Condiciones del secado preliminar de las muestras previo al análisis BET . . . . .                                                                                    | 60 |
| 5.6 | Masa de NaOH requerida para diferentes concentraciones. . . . .                                                                                                       | 63 |
| 5.7 | Volúmenes de HCl y agua destilada requeridos para la preparación de soluciones. . . . .                                                                               | 64 |
| 6.1 | Resultados comparativos de la primera corrida experimental de adsorción de CO <sub>2</sub> , expresados por masa, área superficial y condiciones ambientales. . . . . | 68 |
| 6.2 | Resultados experimentales en función de parámetros morfológicos. . . . .                                                                                              | 73 |
| 6.3 | Parámetros morfológicos complementarios del segundo diseño experimental . . . . .                                                                                     | 75 |
| 6.4 | Segundo diseño experimental: pellets con igual densidad de celdas y distinta morfología interna . . . . .                                                             | 76 |

|      |                                                                                                                                                                                              |    |
|------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 6.5  | Resumen comparativo de los diseños monolíticos evaluados y del carbón activado granular. . . . .                                                                                             | 82 |
| 6.6  | Parámetros de dimensionamiento del sistema DAC para una capacidad de captura de 600 ton CO <sub>2</sub> /año. . . . .                                                                        | 88 |
| 6.7  | Capacidad de captura normalizada por área efectiva para cada diseño evaluado. . .                                                                                                            | 89 |
| 6.8  | Desglose del CAPEX total para una planta DAC de 600 ton CO <sub>2</sub> /año con carbón activado granular, basado en factores porcentuales del costo de equipos entregados (E) [81]. . . . . | 90 |
| 6.9  | Desglose del OPEX anual estimado para la planta DAC, incluyendo criterio de cálculo para cada componente. . . . .                                                                            | 92 |
| 6.10 | Parámetros texturales reportados a partir de los análisis de adsorción–desorción de N <sub>2</sub> . .                                                                                       | 98 |

# Lista de Figuras

|      |                                                                                                                                                                                                                                                           |    |
|------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 1.1  | Concentración de CO <sub>2</sub> atmosférico a lo largo del tiempo [3]. . . . .                                                                                                                                                                           | 1  |
| 1.2  | Predicción de las emisiones de CO <sub>2</sub> con la implementación de tecnologías DAC [6]. .                                                                                                                                                            | 2  |
| 1.3  | Contactores en forma pelletizada y geometría monolítica [9] . . . . .                                                                                                                                                                                     | 3  |
| 1.4  | Estructura interna de carbones monolíticos sinterizados [12]. . . . .                                                                                                                                                                                     | 4  |
| 3.1  | Captura de carbono directamente del aire [14] . . . . .                                                                                                                                                                                                   | 9  |
| 3.2  | Descripción general de la distribución de la temperatura media mensual y la humedad<br>relativa de diferentes ubicaciones de proyectos DAC [17]. . . . .                                                                                                  | 11 |
| 3.3  | Materiales adsorbentes para captura de CO <sub>2</sub> [22]. . . . .                                                                                                                                                                                      | 13 |
| 3.4  | Poros internos del carbón activado como adsorbente de CO <sub>2</sub> [24] . . . . .                                                                                                                                                                      | 14 |
| 3.5  | Diagrama del ciclo TSA para captura de CO <sub>2</sub> . . . . .                                                                                                                                                                                          | 16 |
| 3.6  | Esquema de un sistema de captura de CO <sub>2</sub> por adsorción por oscilación de presión<br>(PSA) [37]. . . . .                                                                                                                                        | 17 |
| 3.7  | Diagrama esquemático del proceso VSA de dos lechos [38]. . . . .                                                                                                                                                                                          | 18 |
| 3.8  | Diagrama esquemático junto con la representación gráfica de la temperatura y presión<br>de un TVSA de 4 pasos [38]. . . . .                                                                                                                               | 19 |
| 3.9  | Imágenes de microscopía electrónica de barrido (SEM) y transmisión (TEM) de<br>carbón activado, que evidencian una morfología irregular con partículas tipo lámina<br>y una estructura altamente porosa con canales bien definidos, adaptado de [43]. . . | 21 |
| 3.10 | Representación esquemática de los principales grupos funcionales superficiales presentes<br>en un carbón activado [44]. . . . .                                                                                                                           | 22 |
| 3.11 | Estructura porosa esquematizada de un carbón activado, mostrando la jerarquía de<br>macroporos, mesoporos y microporos [45]. . . . .                                                                                                                      | 23 |
| 3.12 | Composición del coco [45] . . . . .                                                                                                                                                                                                                       | 24 |
| 3.13 | Representación gráfica en diagrama $q$ vs $p$ de distintos tipos de isothermas de adsorción<br>para sistemas gas-sólido [59]. . . . .                                                                                                                     | 27 |
| 3.14 | Zonas diferenciadas en una curva de ruptura a la salida de una columna de lecho fijo<br>[62] . . . . .                                                                                                                                                    | 31 |

|      |                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |    |
|------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 3.15 | Curva esperada para la determinación del $pH_{PZC}$ de un carbón activado de cáscara de coco activado físicamente con vapor de agua. El $pH_{PZC}$ se identifica como el punto de intersección entre la curva $pH_{final}$ vs. $pH_{inicial}$ y la recta $pH_{final} = pH_{inicial}$ [45]. . . . . | 32 |
| 3.16 | Captura de carbono DAC mediante contactores monolíticos [68]. . . . .                                                                                                                                                                                                                              | 34 |
| 3.17 | Elaboración de pellets monolíticos a partir de carbón activado, zeolita y CMC como aglutinante [73] . . . . .                                                                                                                                                                                      | 35 |
| 3.18 | Diseños CAD para las microestructuras adsorbentes de geometría simple: a) circular, b) cuadrada y c) diseño de canales teselado [76]. . . . .                                                                                                                                                      | 37 |
| 3.19 | Esquema conceptual de los mecanismos de transferencia de masa involucrados en la adsorción de $CO_2$ en monolitos de carbón activado (elaboración propia basada en los mecanismos de transferencia de masa descritos por [58]). . . . .                                                            | 38 |
| 4.1  | Variables dimensionales pellets monolitos. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                 | 40 |
| 4.2  | Diseños elaborados para el primer set experimental. . . . .                                                                                                                                                                                                                                        | 43 |
| 5.1  | Moldes impresos en 3D utilizados para la fabricación de pellets monolíticos con distintas configuraciones geométricas (desde arriba hacia abajo, diseño 1, 2 y 3). . .                                                                                                                             | 46 |
| 5.2  | Diagrama esquemático del dispositivo DAC. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                  | 48 |
| 5.3  | Montaje experimental para dispositivo escala domiciliaria . . . . .                                                                                                                                                                                                                                | 49 |
| 5.4  | Proceso de captura en funcionamiento VSA . . . . .                                                                                                                                                                                                                                                 | 50 |
| 5.5  | Vista esquemática del sensor SCD30. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                        | 51 |
| 5.6  | Sensor PCE-7755 utilizado para la calibración del sensor SCD30 . . . . .                                                                                                                                                                                                                           | 51 |
| 5.7  | Polvo molido con motor de impacto de rotor SR 300 RETSH, el polvo presenta un tamaño de partícula menor a 500 $\mu m$ . . . . .                                                                                                                                                                    | 52 |
| 5.8  | Implementos de laboratorio. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                | 53 |
| 5.9  | Masado de manera manual durante 30-35 min hasta lograr una consistencia homogénea de la pasta. . . . .                                                                                                                                                                                             | 54 |
| 5.10 | Pellets dispuestos en desecadora con sílica gel para eliminar humedad. . . . .                                                                                                                                                                                                                     | 55 |
| 5.11 | Pellets con tratamiento térmico en horno convectivo . . . . .                                                                                                                                                                                                                                      | 56 |
| 5.12 | Carbón activado de cáscara de coco fabricado por Zhulin Activated Carbon Group. . . . .                                                                                                                                                                                                            | 57 |
| 5.13 | Muestras de cada diseño puestas en viales de vidrio . . . . .                                                                                                                                                                                                                                      | 60 |
| 5.14 | Matraces con soluciones acuosas ajustadas a distintos valores de pH inicial. . . . .                                                                                                                                                                                                               | 62 |
| 6.1  | Curvas de ruptura obtenidas del diseño 1, 2 y 3, y la forma granular en función del (a) adsorción normalizada por masa y (b) adsorción normalizada por área. . . . .                                                                                                                               | 67 |

|      |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |     |
|------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 6.2  | Curvas de ruptura obtenidas para los diseños con tamaño de canal de 5 mm y diferente espesor de pared: Diseño 2 (espesor de 7 mm, $S/V = 138.9 \text{ m}^2/\text{m}^3$ ) y Diseño 3 (espesor de 5 mm, $S/V = 200 \text{ m}^2/\text{m}^3$ ), en función de (a) adsorción normalizada por masa y (b) adsorción normalizada por área. . . . . | 69  |
| 6.3  | Curvas de ruptura obtenidas para los diseños con espesor de pared de 7 mm y diferente tamaño de canal: Diseño 1 (canal de 7 mm, $S/V = 142.9 \text{ m}^2/\text{m}^3$ ) y Diseño 2 (canal de 5 mm, $S/V = 138.9 \text{ m}^2/\text{m}^3$ ), en función de (a) adsorción normalizada por masa y (b) adsorción normalizada por área. . . . .   | 71  |
| 6.4  | Relación entre densidad de celda y capacidad de adsorción ( $q$ ) normalizada por masa (A) y normalizada por área (B). . . . .                                                                                                                                                                                                             | 72  |
| 6.5  | Relación entre densidad de celda y capacidad de adsorción ( $q$ ) normalizada por masa (A) y normalizada por área (B). . . . .                                                                                                                                                                                                             | 73  |
| 6.6  | Diseños elaborados para el segundo set experimental . . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                              | 75  |
| 6.7  | Curvas de ruptura obtenidas del diseño 4 y 5 en función de (a) adsorción normalizada por masa y (b) adsorción normalizada por área. . . . .                                                                                                                                                                                                | 77  |
| 6.8  | Curvas de ruptura obtenidas para los diseños 6, 5 y 4 en función de (a) adsorción normalizada por masa y (b) adsorción normalizada por área. . . . .                                                                                                                                                                                       | 78  |
| 6.9  | Esquema conceptual de las etapas de transferencia de masa durante la captura de $\text{CO}_2$ en pellets monolíticos de carbón activado (elaboración propia basada en los mecanismos de transferencia de masa descritos por [58]). . . . .                                                                                                 | 79  |
| 6.10 | Imperfecciones geométricas observadas en el diseño 6. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                              | 80  |
| 6.11 | Evolución de la temperatura durante la adsorción para cada diseño . . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                | 83  |
| 6.12 | Evolución de la humedad relativa durante la adsorción para cada diseño. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                            | 84  |
| 6.13 | Pasos del proceso TVSA en captura DAC [79]. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                                        | 85  |
| 6.14 | Instalación de un sistema de Captura Directa de Aire (DAC) en la planta Haru Oni de HIF [80]. . . . .                                                                                                                                                                                                                                      | 87  |
| 6.15 | Diagrama de procesos TVSA esquemático para el proceso de captura DAC de 600 ton $\text{CO}_2$ /año [36]. . . . .                                                                                                                                                                                                                           | 88  |
| 6.16 | Distribución del CAPEX por tipo de equipo. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                                         | 90  |
| 6.17 | Distribución del CAPEX total. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                                                      | 91  |
| 6.18 | Distribución del OPEX. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                                                             | 93  |
| 6.19 | CAPEX anualizado y OPEX anual para cada diseño de pellet monolítico. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                               | 95  |
| 6.20 | Comparación de LCOC para todos los diseños evaluados. . . . .                                                                                                                                                                                                                                                                              | 95  |
| 6.21 | Curvas de pH final en función del pH inicial correspondientes a la segunda y tercera corrida experimental para la determinación del punto de carga cero. . . . .                                                                                                                                                                           | 100 |

|      |                                                                                                                                                                                                                                                              |     |
|------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 6.22 | Determinación del pH del punto de carga cero a partir del promedio de dos corridas experimentales. Se incluye la recta $pH_{final} = pH_{inicial}$ como referencia teórica. Las barras de error corresponden a la desviación estándar del duplicado. . . . . | 101 |
| A.1  | Dispositivo de captura DAC a partir de carbón activado . . . . .                                                                                                                                                                                             | I   |
| B.1  | Isoterma de adsorción–desorción de $N_2$ a 77 K para la muestra de carbón activado en polvo. . . . .                                                                                                                                                         | II  |
| B.2  | Isotermas de adsorción–desorción de $N_2$ a 77 K para pellets monolíticos de carbón activado (Diseño 4). . . . .                                                                                                                                             | III |
| B.3  | Isotermas de adsorción–desorción de $N_2$ a 77 K para pellets monolíticos de carbón activado (Diseño 5). . . . .                                                                                                                                             | IV  |
| B.4  | Isotermas de adsorción–desorción de $N_2$ a 77 K para pellets monolíticos de carbón activado (Diseño 6). . . . .                                                                                                                                             | V   |
| B.5  | Isoterma de adsorción–desorción de $N_2$ a 77 K para pellets monolíticos de carbón activado triturados (Diseño 4). . . . .                                                                                                                                   | VI  |
| C.1  | Análisis <i>t-plot</i> de la muestra de de carbón activado en polvo. . . . .                                                                                                                                                                                 | II  |
| C.2  | Análisis <i>t-plot</i> del fragmento de pellet monolítico de carbón activado (Diseño 4). . .                                                                                                                                                                 | III |
| C.3  | Análisis <i>t-plot</i> del fragmento de pellet monolítico de carbón activado (Diseño 5). . .                                                                                                                                                                 | IV  |
| C.4  | Análisis <i>t-plot</i> del fragmento de pellet monolítico de carbón activado (Diseño 6). . .                                                                                                                                                                 | V   |
| C.5  | Análisis <i>t-plot</i> del fragmento de pellet monolítico de carbón activado triturado (Diseño 4). . . . .                                                                                                                                                   | VI  |
| D.1  | Distribución de tamaño de poro de la muestra de polvo de carbón activado . . . . .                                                                                                                                                                           | II  |
| D.2  | Distribución de tamaño de poro del fragmento de pellet monolítico de carbón activado (Diseño 4). . . . .                                                                                                                                                     | III |
| D.3  | Distribución de tamaño de poro del fragmento de pellet monolítico de carbón activado (Diseño 5). . . . .                                                                                                                                                     | IV  |
| D.4  | Distribución de tamaño de poro del fragmento de pellet monolítico de carbón activado (Diseño 6). . . . .                                                                                                                                                     | V   |
| D.5  | Distribución de tamaño de poro del pellet monolítico de carbón activado triturado (Diseño 4). . . . .                                                                                                                                                        | VI  |

# Nomenclatura

| Símbolo                      | Significado, unidades                                                                |
|------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------|
| $A_s$                        | Área superficial del adsorbente, $\text{m}^2/\text{g}$                               |
| $C$                          | Concentración de $\text{CO}_2$ , ppm o $\text{mol}/\text{m}^3$                       |
| $C_0$                        | Concentración inicial de $\text{CO}_2$ , ppm o $\text{mol}/\text{m}^3$               |
| $D$                          | Diámetro del canal, m                                                                |
| $D_{\text{CO}_2-\text{air}}$ | Difusividad molecular del $\text{CO}_2$ en aire, $\text{m}^2/\text{s}$               |
| $D_e$                        | Difusividad efectiva, $\text{m}^2/\text{s}$                                          |
| $D_g$                        | Coefficiente de difusión del $\text{CO}_2$ en la fase gaseosa, $\text{m}^2/\text{s}$ |
| $HR$                         | Humedad relativa, %                                                                  |
| $L$                          | Longitud del pellet/monolito, m                                                      |
| $p$                          | Presión, Pa                                                                          |
| $q$                          | Capacidad de adsorción, $\text{mg CO}_2/\text{kg adsorbente}$                        |
| $q_s$                        | Capacidad máxima de adsorción, $\text{mg CO}_2/\text{kg adsorbente}$                 |
| $Re$                         | Número de Reynolds, $= \rho u D_h / \mu$                                             |
| $t$                          | Tiempo, s o min                                                                      |
| $T$                          | Temperatura, K                                                                       |
| $u$                          | Velocidad del flujo, $\text{m}/\text{s}$                                             |
| $V$                          | Volumen de aire tratado, $\text{m}^3$                                                |
| $W$                          | Humedad absoluta, $\text{kg}/\text{m}^3$                                             |
| Símbolo griego               | Significado, unidades                                                                |
| $\eta$                       | Eficiencia de captura, adimensional                                                  |
| $\rho$                       | Densidad del fluido, $\text{kg}/\text{m}^3$                                          |
| $\epsilon$                   | Fracción de vacío (void fraction), adimensional                                      |
| $\tau$                       | Tortuosidad efectiva del medio, adimensional                                         |
| Siglas                       | Significado                                                                          |
| CA                           | Carbón activado                                                                      |
| CMC                          | Carboximetilcelulosa                                                                 |
| DAC                          | Captura directa del aire (Direct Air Capture)                                        |
| TT                           | Tratamiento térmico                                                                  |
| VSA                          | Adsorción por oscilación de vacío                                                    |
| TSA                          | Adsorción por cambio de temperatura                                                  |
| PSA                          | Adsorción por cambio de presión                                                      |
| TVSA                         | Adsorción por oscilación de vacío y temperatura                                      |

# Capítulo 1

## Introducción

La problemática climática actual, causada por actividades humanas como la industrialización y el uso de combustibles fósiles en el transporte, ha generado un aumento significativo de las emisiones de  $\text{CO}_2$ , contribuyendo al calentamiento global y sus consecuencias debido al desarrollo industrial, el transporte, la agricultura y la ganadería. Este aumento ha elevado la temperatura global  $1.4^\circ\text{C}$  por encima de los niveles preindustriales, lo que ha causado efectos como el aumento del nivel del mar, el derretimiento de glaciares y fenómenos meteorológicos extremos [1]. Desde la era industrial a mediados del siglo XVIII (alrededor de 1750), las emisiones de  $\text{CO}_2$  globales han crecido considerablemente llegando a una concentración de 421 ppm en el año 2023 (ver Figura 1.1) [2].

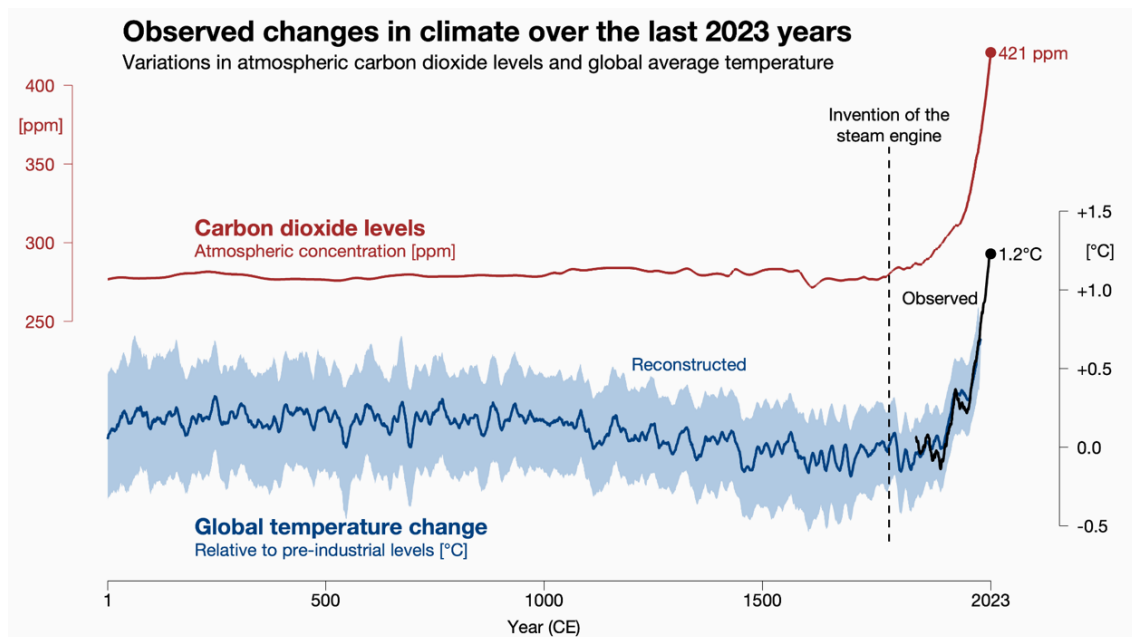


Figura 1.1: Concentración de  $\text{CO}_2$  atmosférico a lo largo del tiempo [3].

Tecnologías como la Captura Directa del Aire (DAC, por sus siglas en inglés) han emergido como soluciones para reducir las concentraciones de CO<sub>2</sub> atmosférico y cumplir con los objetivos climáticos establecidos en el Acuerdo de París (ver Figura 1.2) [1]. Si bien existen varios métodos para la captura de CO<sub>2</sub>, como la absorción química, la separación por membranas y los procesos criogénicos, hay un creciente interés en los adsorbentes sólidos debido a su potencial para reducir el consumo de energía durante la regeneración en comparación con los disolventes [4]. En particular, el carbón activado ha captado una atención significativa como adsorbente potencial para la captura de CO<sub>2</sub> debido a sus ventajas inherentes, como bajo costo, alta porosidad y afinidad química con el CO<sub>2</sub> [5].

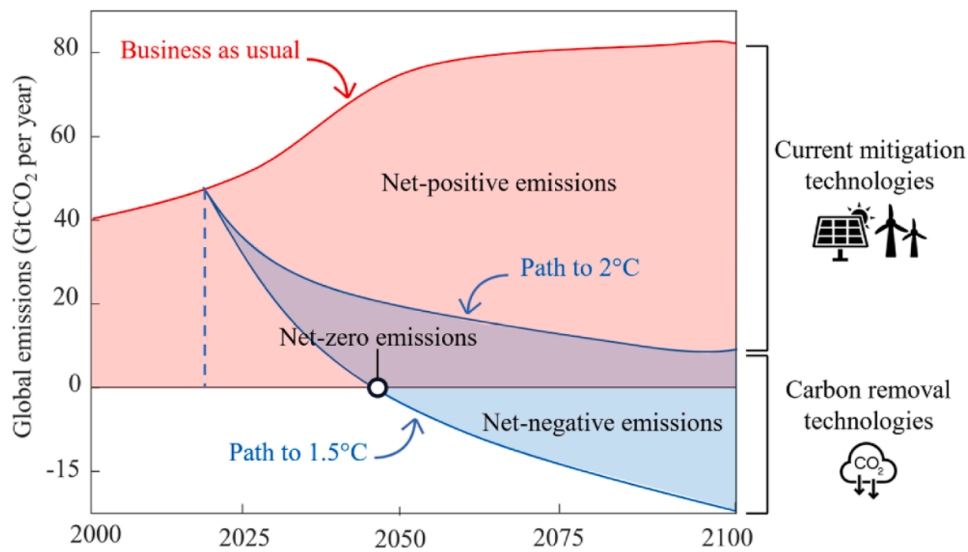


Figura 1.2: Predicción de las emisiones de CO<sub>2</sub> con la implementación de tecnologías DAC [6].

El carbón activado derivado de cáscara de coco destaca frente a otros carbones obtenidos desde biomasa debido a su elevada microporosidad, alta área superficial específica (hasta 1500–2000, m<sup>2</sup>/g), mayor resistencia mecánica y bajo contenido de cenizas, características especialmente favorables para procesos DAC. Diversos estudios reportan capacidades de adsorción de CO<sub>2</sub> entre 3.7 y 4.8 mmol/g para carbones de cáscara de coco, mientras que materiales derivados de bambú o bagazo de caña suelen presentar valores entre 1.4 y 2.7 mmol/g bajo condiciones similares, lo que evidencia capacidades de captura hasta 2–3 veces superiores [7]. Más allá del área BET total, su principal ventaja radica en la elevada fracción de microporos ultrafinos, los cuales favorecen la adsorción de CO<sub>2</sub> a bajas presiones parciales debido a una mayor interacción entre las moléculas adsorbidas y las paredes del poro. Además, su mayor dureza y estabilidad estructural reducen la generación de finos y favorecen su desempeño en ciclos repetidos de adsorción–desorción.

El rendimiento de estos sistemas de lecho fijo se evalúa críticamente mediante curvas de ruptura, que representan la concentración del adsorbato (en este caso,  $\text{CO}_2$ ) en el gas effluente en función del tiempo o del volumen de gas procesado. Estas curvas determinan la capacidad de adsorción del material, la cinética del proceso de adsorción y la eficiencia general del sistema. Por lo tanto, comprender y optimizar el comportamiento de ruptura es esencial para el diseño y operación efectivos de los sistemas de captura de  $\text{CO}_2$  [8].

Las formas físicas del carbón activado tales como polvo, pellets y monolitos tipo *honeycomb* influyen de manera decisiva en su desempeño durante procesos de adsorción. Comercialmente, estos materiales se encuentran desde polvos finos hasta pellets cilíndricos y estructuras monolíticas. Los polvos ofrecen una gran superficie específica, pero generan caídas de presión extremadamente altas en lechos empacados. Los pellets, en cambio, reducen significativamente la caída de presión y son mecánicamente estables, aunque presentan limitaciones de transferencia de masa debido a su geometría y al empaquetamiento aleatorio del lecho. Por su parte, los monolitos tipo *honeycomb* proporcionan ventajas notables para procesos de adsorción: poseen canales paralelos regulares que minimizan la caída de presión, reducen el riesgo de abrasión o rotura y pueden mejorar la distribución de flujo, así como los procesos de transferencia de calor y masa.



Figura 1.3: Contactores en forma pelletizada y geometría monolítica [9]

En este trabajo también se estudia una geometría intermedia denominada pellet monolítico. Este corresponde a una pieza individual del tamaño de un pellet convencional pero cuya estructura interna contiene canales monolíticos regulares. De esta forma combina, características propias de ambos sistemas: mantiene la resistencia mecánica, facilidad de manufactura y densidad del lecho propias de los pellets, pero incorpora los beneficios hidrodinámicos y de transferencia de masa de los monolitos. Esta hibridación geométrica busca maximizar área de contacto y eficiencia de adsorción

sin incurrir en los altos costos o complejidades de fabricación de monolitos de gran tamaño.

Estas distintas geometrías de carbón activado (polvos, pellets, monolitos y pellets monolíticos) presentan ventajas y limitaciones según su forma, afectando directamente la caída de presión, la eficiencia de transferencia de masa y, en consecuencia, su desempeño en procesos DAC y en aplicaciones industriales de eliminación de  $\text{CO}_2$  [7, 10, 11].

Los pellets monolíticos representan una alternativa estructurada que permite optimizar el rendimiento del carbón activado sin recurrir a métodos de fabricación complejos. A diferencia de los gránulos convencionales, estos pellets incorporan una geometría interna controlada que permite ajustar parámetros morfológicos clave, tales como el tamaño del canal, el espesor de pared o la densidad de celdas, los cuales influyen directamente en la difusión del  $\text{CO}_2$  y la eficiencia de captura. Si bien existen estudios sobre monolitos cerámicos o de carbono aplicados principalmente a catálisis, filtración o separación de gases, el desempeño de monolitos de carbón activado específicamente orientados a captura DAC y fabricados en tamaños equivalentes a pellets ha sido muy poco explorado [10]. En este contexto, este trabajo aporta evidencia sistemática sobre cómo la configuración interna afecta la transferencia de masa y el rendimiento en condiciones DAC. En particular, se muestra que optimizar la estructura interna balancea las resistencias internas y externas al transporte de masa, mejorando la cinética de adsorción sin comprometer la estabilidad estructural (ver Figura 1.4) [12]. Esto se traduce en un mejor desempeño en operación cíclica adsorción–desorción, especialmente relevante para sistemas DAC que operan bajo vacío.

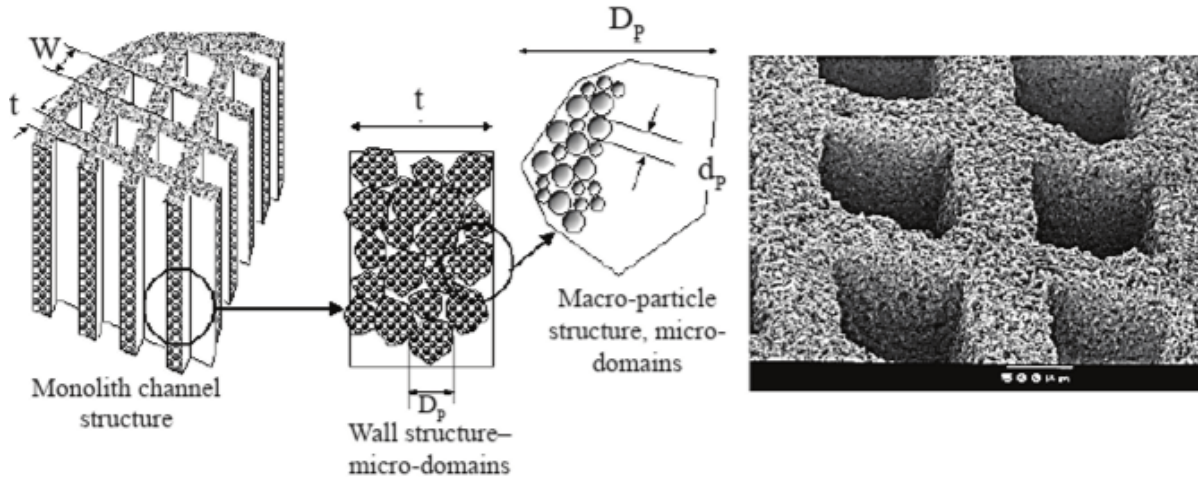


Figura 1.4: Estructura interna de carbones monolíticos sinterizados [12].

Esta tesis tiene como objetivo investigar el efecto de la morfología de los pellets monolíticos de carbón activado en la curva de ruptura de  $\text{CO}_2$  durante la captura directa de aire. Se profundiza en los principios fundamentales de la adsorción de  $\text{CO}_2$  en carbón activado, el concepto de curvas

de ruptura, la influencia de la forma y el tamaño de los gránulos en general, un análisis detallado de las estructuras monolíticas y una comparación de su rendimiento con otras formas de gránulos. Debido a esto, y según lo mencionado anteriormente, la pregunta de investigación a resolver en este trabajo es evaluar si es posible mejorar el rendimiento de adsorción de  $\text{CO}_2$  en sistemas de captura directa de aire mediante el uso de pellets monolíticos de carbón activado, en comparación con el uso de carbón activado granular, considerando especialmente el efecto de su morfología interna sobre la eficiencia del proceso.

# Capítulo 2

## Objetivos y Alcances

### 2.1 Objetivo General

Determinar la influencia de la morfología de pellets monolíticos de carbón activado en la eficiencia del proceso de captura directa del aire (DAC), considerando parámetros de adsorción y criterios de viabilidad técnico-económica.

### 2.2 Objetivos Específicos

- i. Evaluar el rendimiento de adsorción de  $\text{CO}_2$  de pellets monolíticos de carbón activado en comparación con la forma granular.
- ii. Analizar la influencia de los parámetros geométricos internos de los pellets monolíticos, tales como tamaño de canal y espesor de pared, sobre el rendimiento de adsorción y accesibilidad del adsorbato.
- iii. Identificar la morfología más competitiva mediante un análisis técnico-económico de las distintas configuraciones de pellets monolíticos, evaluando costos de inversión (CAPEX), costos de operación (OPEX) y el costo nivelado de captura (LCOC).
- iv. Evaluar las propiedades fisicoquímicas del carbón activado granular y pellets monolíticos, en términos de área superficial, porosidad y pH de carga cero, con el fin de establecer su

potencial de desempeño en procesos de captura de  $\text{CO}_2$ .

## 2.3 Hipótesis

Si se controla la morfología interna de los pellets monolíticos de carbón activado, en particular el espesor de pared y el tamaño de canal, entonces es posible mejorar la eficiencia del proceso de captura directa de aire en comparación con adsorbentes no estructurados, debido al aumento del área efectiva de contacto aire-adsorbente.

## 2.4 Alcances

Esta tesis aborda el diseño, construcción y evaluación experimental de un dispositivo para la medición de curvas de ruptura de  $\text{CO}_2$  en aire en condiciones estáticas, empleando como material adsorbente carbón activado derivado de cáscara de coco. Se propone una aproximación modular basada en la fabricación manual de pellets monolíticos con geometría interna controlada, moldeados a partir de carbón activado en polvo y carboximetilcelulosa (CMC) como aglutinante. La morfología de los pellets, específicamente el tamaño del canal interno y el espesor de pared, se estudia como variable que influye en la capacidad de adsorción y en el comportamiento de las curvas de ruptura.

El sistema experimental desarrollado está constituido por una caja hermética fabricada en acrílico transparente, con sensores de concentración de  $\text{CO}_2$ , temperatura y humedad relativa, que permiten monitorear en tiempo real el comportamiento del adsorbente bajo condiciones ambientales controladas. Además, se incorpora una bomba de vacío de baja presión para permitir la regeneración cíclica del material. La caja funciona en modo batch, y se evalúa el comportamiento del sistema mediante curvas de ruptura a lo largo de más de 13 horas de operación.

El alcance de este trabajo incluye la comparación de distintos diseños de pellets monolíticos (variando el tamaño del canal y espesor de pared), el análisis cuantitativo de la capacidad de adsorción mediante integración de curvas de ruptura, y la identificación preliminar de las condiciones geométricas más favorables para maximizar la eficiencia de captura de  $\text{CO}_2$  en sistemas DAC de baja escala.

# Capítulo 3

## Marco Teórico

A continuación, se establecen las bases teóricas del presente trabajo que incluye conceptos de proyectos de captura directa del aire (DAC), tecnologías disponibles, fundamentos de adsorción de  $\text{CO}_2$  en carbón activado y pellets monolíticos de carbón activado.

### 3.1 Captura Directa del Aire

La Captura Directa del Aire (DAC) es una técnica diseñada para extraer dióxido de carbono directamente de la atmósfera, evitando su reemisión y logrando así un efecto neto de emisiones negativas de  $\text{CO}_2$ . Este proceso juega un papel crucial en la mitigación de las emisiones atmosféricas, especialmente cuando se alimenta con energías renovables (como solar, eólica o geotérmica), ya que reduce aún más su huella de carbono al eliminar la dependencia de combustibles fósiles. Las tecnologías DAC se asemejan a aquellas empleadas para capturar emisiones de fuentes puntuales, como plantas industriales o centrales termoeléctricas, pero están adaptadas para el aire atmosférico. Utilizan contactores aire-adsorbente, los cuales pueden ser mediante disolventes acuosos o adsorbentes sólidos. Posteriormente, se aplica calor para liberar el  $\text{CO}_2$ , facilitando su compresión y transporte hacia sitios de almacenamiento [13]. Un aspecto fundamental de la tecnología de Captura Directa de Aire S-DAC es el uso de adsorbentes sólidos para capturar  $\text{CO}_2$  del aire ambiente a temperatura ambiente y presión atmosférica. El proceso implica la captura inicial de  $\text{CO}_2$ , que luego se libera de los sorbentes a bajas presiones y temperaturas moderadas (80-100°C) a través de un proceso de oscilación térmica al vacío. Este ciclo de adsorción y desorción

permite una captura continua de  $\text{CO}_2$  del aire, resultando en la obtención de  $\text{CO}_2$  puro que puede ser utilizado o almacenado [14]. Cuando el sistema opera con energías renovables, la eficiencia ambiental del proceso se maximiza, asegurando que toda la cadena de captura sea sostenible. Un diagrama de este proceso se muestra en la Figura 3.1.

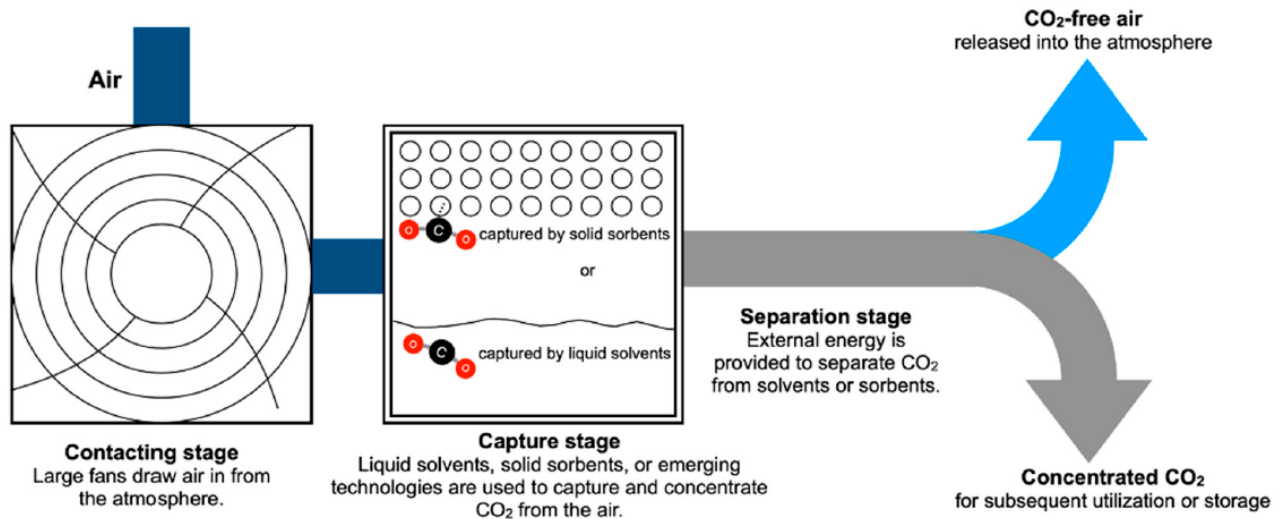


Figura 3.1: Captura de carbono directamente del aire [14]

### 3.1.1 Tecnologías disponibles

En el proceso de captura directa de  $\text{CO}_2$  atmosférico (DAC), la selección de sorbentes sólidos es crucial para la eficiencia del sistema, y muchas tecnologías modernas optan por estos sorbentes debido a sus ventajas energéticas. Por ejemplo, la empresa europea Climeworks utiliza un sistema de adsorción por oscilación térmica y de vacío (TVSA), que opera en condiciones cercanas al vacío para facilitar la desorción del  $\text{CO}_2$  capturado [15]. En contraste, Carbon Engineering implementa un proceso de absorción química con hidróxido acuoso (hidróxido de potasio,  $\text{KOH}$ ), el cual se regenera a  $674^\circ\text{C}$  en un calcinador [16]. Tanto Climeworks como Global Thermostat emplean un polímero funcionalizado con amina como adsorbente; sin embargo, utilizan métodos distintos para la regeneración: la oscilación de temperatura al vacío (TVSA) en el caso de Climeworks y la oscilación de temperatura asistida por vapor (S-TSA) para Global Thermostat [17].

Comparando las tecnologías actuales, la captura de carbono mediante solventes líquidos (L-DAC) presenta un alto consumo energético y requiere equipos resistentes a la corrosión. Este tipo de proceso suele basarse en soluciones de aminas o carbonatos alcalinos, donde el  $\text{CO}_2$  se absorbe químicamente en fase líquida y posteriormente se regenera mediante un ciclo térmico intensivo.

En cambio, la captura mediante adsorbentes sólidos (S-DAC), incluyendo aminas soportadas y materiales porosos, reduce los riesgos de corrosión, pero enfrenta complejidades en el diseño de plantas y mayores costos de inversión. Por otro lado, las tecnologías emergentes como ESA (Electrochemical CO<sub>2</sub> Capture), MSA (Moisture-Sensitive Adsorption) y m-DAC (Membrane Direct Air Capture) muestran un gran potencial a pesar de estar aún en fase de investigación, con aplicaciones limitadas a gran escala [14]. Estas tecnologías destacan por su eficiencia en el consumo energético y su simplicidad operativa, lo que las posiciona como opciones viables para el futuro. La Tabla 3.1 resume las tecnologías de adsorción en DAC y sus respectivas ventajas y desventajas.

Tabla 3.1: Tecnologías existentes de captura de carbono directa de aire [14]

| Tecnología | Principio                                                                                                       | Material<br>Comúnmente<br>Empleado | Ventaja                                                    | Desventaja                                              |
|------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------|------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------|
| L-DAC      | Disolvente líquido captura CO <sub>2</sub> formando carbonatos y lo libera al calentarse.                       | Soluciones alcalinas               | Operación a gran escala; bajo costo.                       | Alta temperatura; alto consumo energético.              |
| S-DAC      | Sorbente sólido captura CO <sub>2</sub> a temperatura y presión ambientales, lo libera en condiciones de vacío. | Sorbentes a base de aminas         | Modular y escalable; menor consumo energético.             | Operaciones por lotes; altos costos de construcción.    |
| ESA        | Celda electroquímica que modula carga para adsorción y desorción de CO <sub>2</sub> .                           | Celda electroquímica               | Eficiente en espacio; bajo consumo energético.             | Altos costos de inversión.                              |
| MSA        | Sorbentes que capturan CO <sub>2</sub> en condiciones secas y lo liberan en condiciones húmedas.                | Resinas de intercambio iónico      | Bajo consumo energético; integración con energías limpias. | Requiere mucha agua; sensible a condiciones climáticas. |
| m-DAC      | Membranas que separan y capturan CO <sub>2</sub> del aire.                                                      | Membranas compuestas ultrafinas    | Bajo consumo energético; bajo impacto ambiental.           | Bajo rendimiento; altos costos de materiales.           |

Investigaciones han demostrado que la humedad es un factor crítico que afecta la eficiencia de captura [18]. En procesos de captura DAC, la capacidad de CO<sub>2</sub> del sorbente disminuye con la temperatura, lo que hace que la productividad sea mayor a bajas temperaturas ambiente. A medida que aumenta la humedad, la capacidad del sorbente también incrementa, especialmente a bajas temperaturas (<30°C), debido a que el agua adsorbida (H<sub>2</sub>O) actúa como mediador: reacciona con el CO<sub>2</sub> en sitios activos (como grupos amínicos) para formar bicarbonatos, mejorando así la

captura. Sin embargo, este efecto se invierte a temperaturas superiores a 30°C, donde la humedad excesiva compite con el CO<sub>2</sub> por los mismos sitios activos del sorbente, reduciendo su eficiencia. Además, a altas temperaturas, el agua adsorbida requiere más energía para ser removida durante la regeneración del sorbente, aumentando el consumo energético total [19]. Este balance entre temperatura y humedad explica por qué condiciones frías y húmedas son ideales para la adsorción, mientras que en ambientes cálidos y húmedos la productividad disminuye. La Figura 3.2 representa la distribución de temperatura mensual y la humedad para distintos proyectos de captura DAC, ilustrando estas interacciones clave.

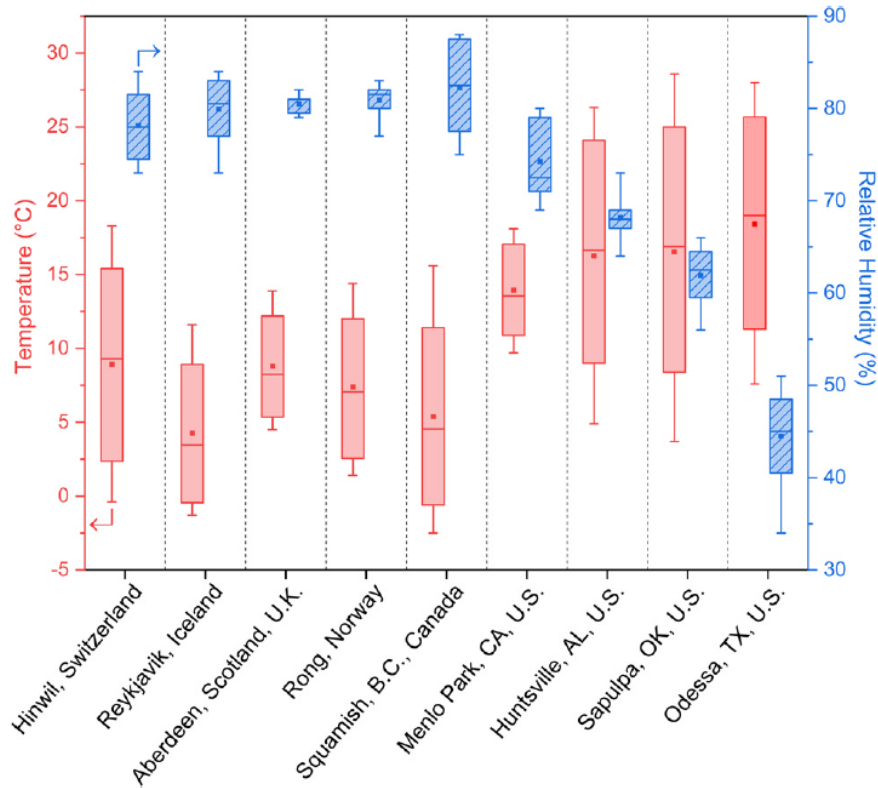


Figura 3.2: Descripción general de la distribución de la temperatura media mensual y la humedad relativa de diferentes ubicaciones de proyectos DAC [17].

## 3.2 Materiales adsorbentes para la captura de carbono

Los materiales adsorbentes desempeñan un papel determinante en la eficiencia de los procesos de separación de gases, especialmente en la captura de CO<sub>2</sub> a partir de corrientes extremadamente diluidas como el aire. Su rendimiento depende estrechamente de sus propiedades estructurales,

químicas y morfológicas, que definen la capacidad del sorbente para almacenar  $\text{CO}_2$ , la rapidez con que puede hacerlo y la energía necesaria para su regeneración. Tradicionalmente, los adsorbentes sólidos utilizados en captura de  $\text{CO}_2$  se presentan en forma granular, con tamaños que pueden variar desde pellets de aproximadamente 12 mm de diámetro hasta partículas finas del orden de 50  $\mu\text{m}$ . Para su aplicación industrial, estos materiales deben poseer suficiente resistencia mecánica para evitar su fractura durante la operación, soportar el peso del lecho y mantener su integridad ante ciclos repetidos de adsorción–desorción, lo cual es crucial para asegurar estabilidad a largo plazo [20].

Además del aspecto mecánico, la eficiencia del adsorbente depende de características fundamentales como la superficie específica, la distribución de poros, la selectividad química hacia  $\text{CO}_2$  y la energía requerida para liberar el gas capturado durante la desorción. En general, se desea que los materiales posean una gran área superficial y un volumen de poro adecuado para maximizar el número de sitios activos accesibles para el  $\text{CO}_2$  [21]. Igualmente importante es que la cinética de adsorción sea rápida, lo cual se favorece con poros meso–microporosos interconectados que permitan una difusión eficiente en condiciones de aire prácticamente estancado. Por otro lado se desea que la selectividad, especialmente frente al vapor de agua, dado que en la atmósfera el  $\text{H}_2\text{O}$  se adsorbe de manera preferencial sobre muchos materiales, desplazando al  $\text{CO}_2$  y reduciendo la capacidad efectiva del sorbente.

La estabilidad térmica y química también constituye un requisito esencial, pues los adsorbentes deben tolerar temperaturas de regeneración que, según el tipo de proceso DAC, pueden variar desde condiciones suaves de 80–120°C en procesos amínicos hasta más de 800°C en sistemas basados en óxidos [17]. En materiales funcionalizados con aminas, por ejemplo, se busca un equilibrio entre una alta reactividad química con  $\text{CO}_2$  y una suficiente estabilidad para resistir oxidación y desactivación por humedad. Por otro lado, materiales avanzados como los metal–organic frameworks (MOFs), carbones activados, zeolitas y polímeros de red porosa (POPs) exhiben arquitecturas altamente ordenadas que permiten controlar la microestructura del adsorbente, optimizando características como la accesibilidad de los poros, la densidad de funcionalización química y el calor de adsorción [22].

En la Figura 3.3 se presenta un esquema general de las principales familias de materiales adsorbentes utilizados en captura de  $\text{CO}_2$ , basado en la clasificación propuesta por [22]. Este diagrama permite visualizar la amplia diversidad de materiales, que abarca desde adsorbentes físicos como carbones activados y zeolitas, hasta adsorbentes químicos como óxidos alcalinos, sorbentes amínicos y materiales híbridos. Sin embargo, más allá de la clasificación, la elección de un material

adecuado para aplicaciones DAC depende de su capacidad para maximizar la captura a bajas concentraciones, minimizar las pérdidas por humedad, reducir la energía de regeneración y mantener un rendimiento estable durante miles de ciclos, requisitos que no siempre cumplen los materiales tradicionales en forma granular [22].

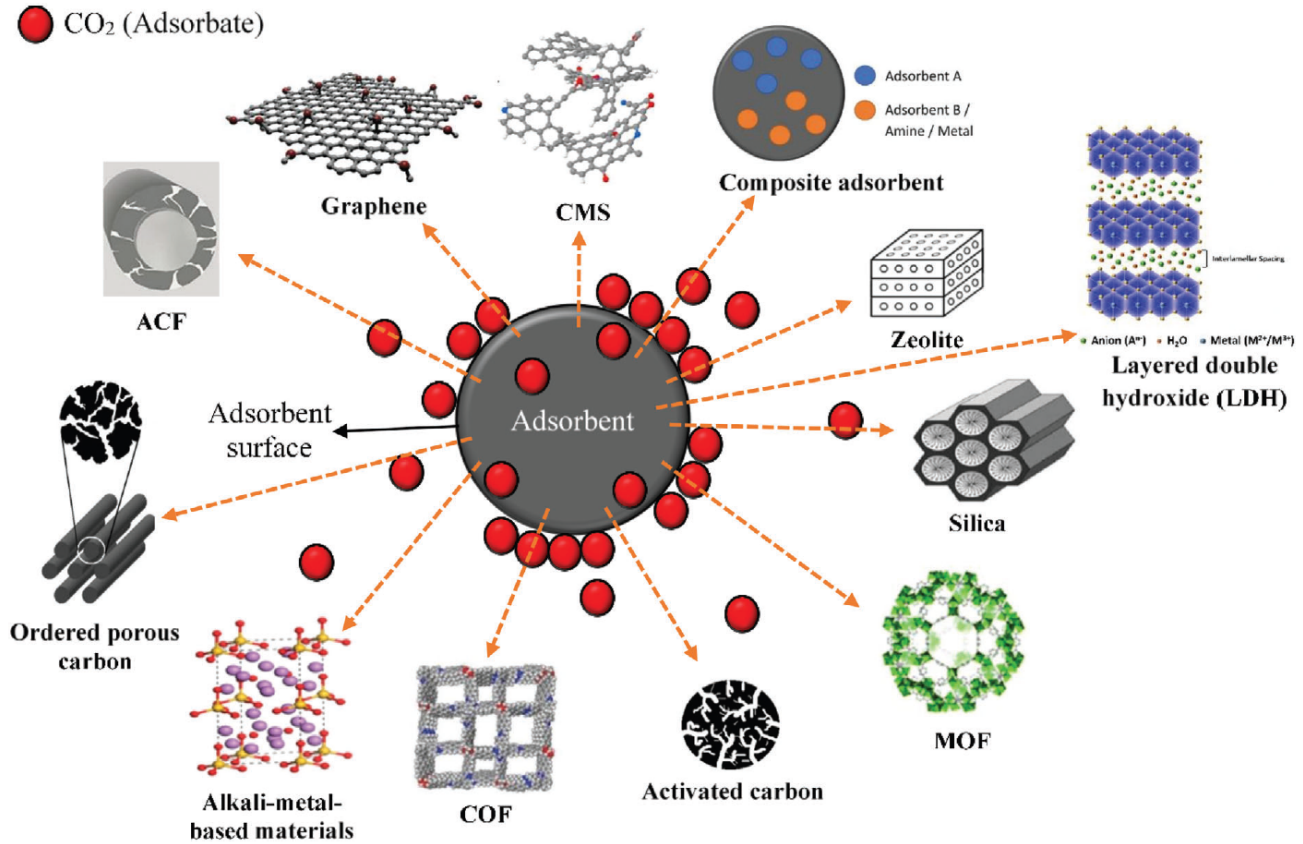


Figura 3.3: Materiales adsorbentes para captura de  $\text{CO}_2$  [22].

Entre los materiales adsorbentes más comunes para la captura de  $\text{CO}_2$  destacan las zeolitas, los materiales basados en carbono, las sílicas mesoporosas y los MOFs (Metal-Organic Frameworks).

### 3.2.1 Carbón activado como adsorbente

El carbón activado (AC) se ha consolidado como uno de los adsorbentes más estudiados y utilizados para la captura de dióxido de carbono debido a su elevada área superficial, estructura porosa bien desarrollada, estabilidad térmica y química, y bajo costo de producción en comparación con otros materiales adsorbentes como zeolitas, óxidos metálicos, sílices mesoporosas y materiales avanzados [23]. Estas características lo convierten en un material particularmente atractivo para aplicaciones

de separación y purificación de gases, así como para procesos de captura directa de  $\text{CO}_2$  desde corrientes diluidas como el aire ambiente.

El desempeño del carbón activado en la adsorción de  $\text{CO}_2$  depende tanto de su textura porosa (área BET, volumen de poros y distribución de tamaños de poro) como de su química superficial. Diversos estudios han demostrado que parámetros operacionales como la presión y la temperatura influyen significativamente en la capacidad de adsorción, así como en la cinética del proceso, siendo estos aspectos fundamentales para evaluar la viabilidad de sistemas de captura basados en adsorción [24]. En este contexto, la caracterización mediante isotermas de adsorción y modelos cinéticos se ha convertido en una herramienta clave para describir los mecanismos de almacenamiento, separación y purificación de gases.

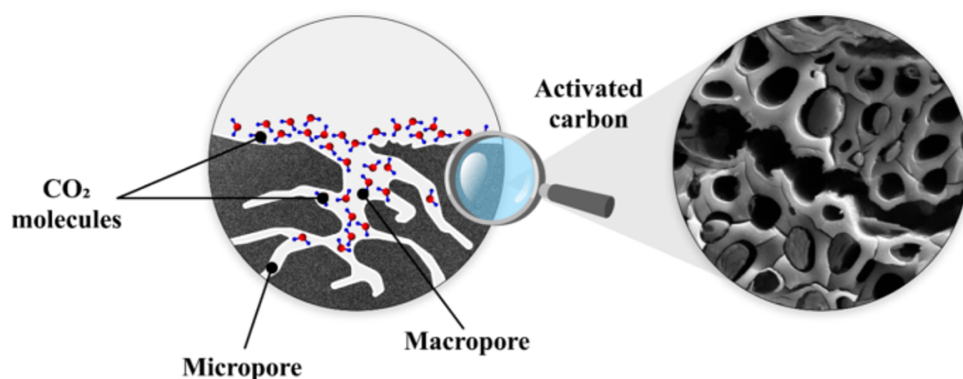


Figura 3.4: Poros internos del carbón activado como adsorbente de  $\text{CO}_2$  [24]

Dentro de los precursores lignocelulósicos utilizados para la síntesis de carbón activado, la biomasa residual ha adquirido especial relevancia por su abundancia, bajo costo y potencial de valorización ambiental. En particular, la cáscara de coco ha demostrado ser un precursor altamente eficaz para la producción de carbón activado, debido a su elevada densidad de carbono, bajo contenido de cenizas y capacidad para desarrollar una red microporosa favorable para la adsorción de  $\text{CO}_2$  [21]. Estudios previos han reportado que los carbones activados derivados de cáscara de coco presentan capacidades de adsorción competitivas, especialmente cuando se emplean métodos de activación química con agentes alcalinos como  $\text{KOH}$ ,  $\text{NaOH}$  o  $\text{K}_2\text{CO}_3$  [23].

En la Tabla 3.2 se presenta una comparación de la capacidad de adsorción de  $\text{CO}_2$  de distintos carbones activados derivados de biomasa, preparados mediante diversos agentes de activación y evaluados bajo diferentes condiciones de operación. Los resultados evidencian que el carbón activado obtenido a partir de cáscara de coco exhibe un rendimiento sobresaliente y una notable versatilidad frente a distintos métodos de activación, manteniendo capacidades elevadas incluso

bajo condiciones moderadas de temperatura y presión. Estas características refuerzan su potencial como adsorbente para aplicaciones de captura directa de  $\text{CO}_2$  [23].

Tabla 3.2: Capacidad de adsorción de  $\text{CO}_2$  para distintos carbones activados derivados de biomasa [23].

| Ref. | Precursor           | Agente de activación    | Área BET ( $\text{m}^2/\text{g}$ ) | T ( $^\circ\text{C}$ ) | P (kPa) | Capacidad (mmol/g) |
|------|---------------------|-------------------------|------------------------------------|------------------------|---------|--------------------|
| [25] | Cáscara de coco     | $\text{K}_2\text{CO}_3$ | 1082                               | 25                     | 100     | 3.71               |
| [26] | Cáscara de coco     | KOH                     | 1593                               | 0                      | 100     | 4.47               |
| [27] | Cáscara de coco     | KOH                     | 1335                               | 25                     | 100     | 4.80               |
| [21] | Cáscara de coco     | $\text{CO}_2$           | 1327                               | 25                     | 100     | 3.90               |
| [28] | Bambú               | KOH                     | 540                                | 25                     | 15      | 1.50               |
| [29] | Bambú               | $\text{H}_3\text{PO}_4$ | 1492                               | 25                     | 100     | 1.45               |
| [30] | Rastrojo de maíz    | KOH                     | 2442                               | 0                      | 100     | 7.14               |
| [30] | Bagazo de caña      | $\text{CO}_2$           | 622                                | 25                     | 100     | 2.55               |
| [31] | Bagazo de caña      | $\text{H}_3\text{PO}_4$ | 873                                | 25                     | 100     | 2.68               |
| [31] | Bagazo de caña      | NaOH                    | 1149                               | 25                     | 100     | 4.28               |
| [32] | Plástico residual   | KOH                     | 1812                               | 25                     | 101.3   | 4.42               |
| [33] | Cáscara de avellana | KOH                     | 1696                               | 25                     | 100     | 4.23               |

Entre los adsorbentes comparados, el carbón activado derivado de cáscara de coco destaca por su rendimiento sobresaliente en la captura de  $\text{CO}_2$ . Además, este precursor muestra buena versatilidad con distintos agentes de activación ( $\text{K}_2\text{CO}_3$ ,  $\text{CO}_2$ ).

### 3.3 Métodos de Adsorción Industrial

#### 3.3.1 Adsorción por oscilación de temperatura (TSA)

La adsorción por oscilación de temperatura (TSA) es un proceso ampliamente estudiado para la captura de  $\text{CO}_2$  debido a su capacidad de operar utilizando fuentes de calor de baja temperatura, como calor residual proveniente de procesos industriales o gases de combustión, lo que contribuye a reducir los costos operativos. Durante la fase de adsorción, el  $\text{CO}_2$  presente en el gas fluye a través de un lecho de adsorbente a temperaturas bajas, donde se fija en la superficie del material debido a interacciones químicas, separándolo de otros componentes del gas. El equilibrio de adsorción es favorecido en condiciones de menor temperatura y mayor presión, maximizando la captura de  $\text{CO}_2$  [34]. En TSA, la regeneración del adsorbente generalmente se realiza calentando

el lecho a temperaturas de entre 120°C y 150°C, utilizando métodos indirectos como chaquetas térmicas, resistencias eléctricas o fluidos calientes. Posteriormente, se aplica una purga breve con gases calientes como nitrógeno o aire a temperaturas similares, lo que permite la desorción del CO<sub>2</sub> [35]. En la Figura 3.5 se presenta un diagrama del ciclo TSA elaborado a partir de la literatura, el cual representa las principales etapas del proceso, incluyendo adsorción, calentamiento, desorción y enfriamiento, así como la evolución cualitativa de variables como temperatura, presión y concentración de CO<sub>2</sub> a lo largo del lecho adsorbente.

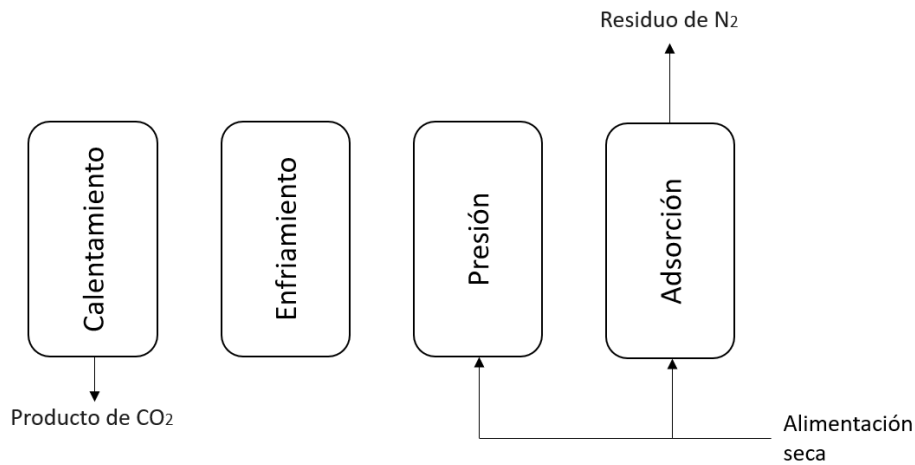


Figura 3.5: Diagrama del ciclo TSA para la captura de CO<sub>2</sub> [36].

El ciclo considera cuatro etapas principales:

- (i) Adsorción a baja temperatura, donde el CO<sub>2</sub> es retenido en el adsorbente.
- (ii) Calentamiento del lecho, que favorece la desorción.
- (iii) Desorción del CO<sub>2</sub> a alta temperatura.
- (iv) Enfriamiento del sistema para restablecer las condiciones iniciales.

Estos enfoques pueden diluir el CO<sub>2</sub> recuperado y presentan desafíos de escalabilidad para lechos de gran tamaño (mayor a 2 metros de diámetro). Métodos alternativos, como la adsorción por oscilación eléctrica (ESA), generan calor directamente mediante corriente eléctrica a través de adsorbentes conductores, logrando una mayor eficiencia energética, aunque con limitaciones prácticas debido a la disponibilidad de materiales especializados [35].

### 3.3.2 Adsorción por oscilación de presión (PSA)

La adsorción por oscilación de presión (PSA) es un proceso cíclico diseñado para separar gases, como el  $\text{CO}_2$ , utilizando materiales adsorbentes porosos y variando periódicamente la presión en el sistema. Un ciclo básico de PSA incluye cuatro etapas principales: presurización, donde se introduce la mezcla de gases en el lecho adsorbente y se aumenta la presión para que el material capture el  $\text{CO}_2$ ; adsorción, en la que el  $\text{CO}_2$  es retenido por el adsorbente mientras otros gases, como el  $\text{N}_2$ , atraviesan el lecho y se recolectan; despresurización, durante la cual se reduce rápidamente la presión, liberando el  $\text{CO}_2$  capturado para su recolección; y purgado, que consiste en un flujo contracorriente de gas inerte a baja presión para eliminar cualquier residuo de  $\text{CO}_2$  y regenerar el material para el siguiente ciclo. Este proceso es eficiente para separaciones de  $\text{CO}_2$  en mezclas gaseosas y se basa en materiales como carbones activados, zeolitas y MOFs, seleccionados por su alta afinidad hacia el  $\text{CO}_2$ .

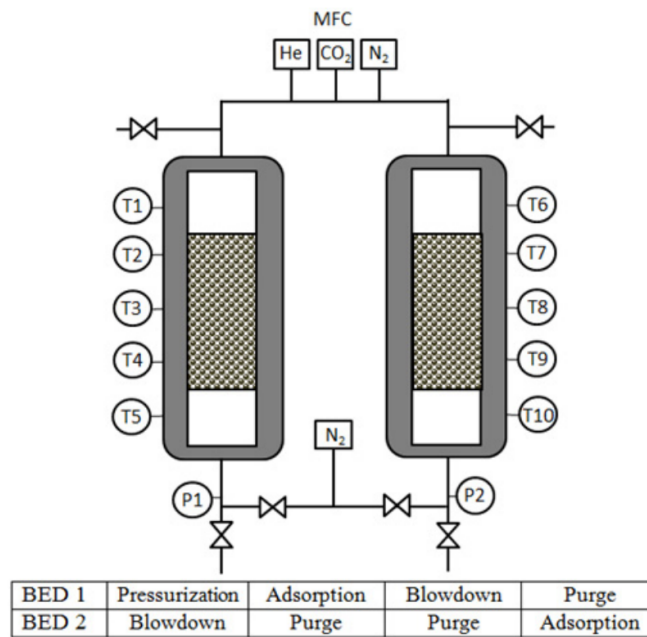


Figura 3.6: Esquema de un sistema de captura de  $\text{CO}_2$  por adsorción por oscilación de presión (PSA) [37].

Los parámetros clave de desempeño incluyen la pureza del gas separado, la recuperación de  $\text{CO}_2$  y la productividad del sistema [37]. La Figura 3.6 muestra un esquema del proceso de adsorción por PSA. En los sistemas PSA se utilizan comúnmente dos o más columnas adsorbentes operando de manera alternada para garantizar un proceso continuo de separación. Mientras una columna se encuentra en la etapa de adsorción capturando  $\text{CO}_2$ , la otra puede estar simultáneamente en despresurización, purga o regeneración. Esta configuración permite mantener una producción

continúa de gas tratado sin interrumpir el proceso durante la regeneración del adsorbente. Además, el uso de múltiples columnas mejora la estabilidad operacional, la recuperación de  $\text{CO}_2$  y la eficiencia global del sistema, asegurando que siempre exista al menos una columna disponible para la etapa de captura.

### 3.3.3 Adsorción por oscilación al vacío (VSA)

La adsorción por oscilación al vacío (VSA) es una técnica avanzada para capturar  $\text{CO}_2$  de mezclas de gases, que utiliza adsorbentes sólidos y un ciclo de desorción al vacío para regenerar el material y liberar el gas capturado. VSA se distingue por operar a presiones más bajas y consumir menos energía en comparación con otros métodos, como la absorción con aminas [22]. Este proceso es particularmente útil para aplicaciones industriales debido a su eficiencia y flexibilidad para manejar diversas condiciones operativas. Aunque enfrenta desafíos como el consumo energético y la resistencia al transporte de masa, el desarrollo de adsorbentes estructurados, como monolitos de carbón activado y zeolitas utilizadas en sistemas VSA, ha mejorado significativamente el desempeño del proceso, reduciendo la caída de presión y permitiendo altas tasas de captura y recuperación de  $\text{CO}_2$ , con purezas superiores al 95% reportadas en configuraciones optimizadas [38]. Estudios recientes han optimizado configuraciones y materiales para hacer de VSA una opción más viable en la captura de  $\text{CO}_2$  a gran escala [38]. La Figura 5.4 muestra un esquema del proceso de adsorción por VSA.

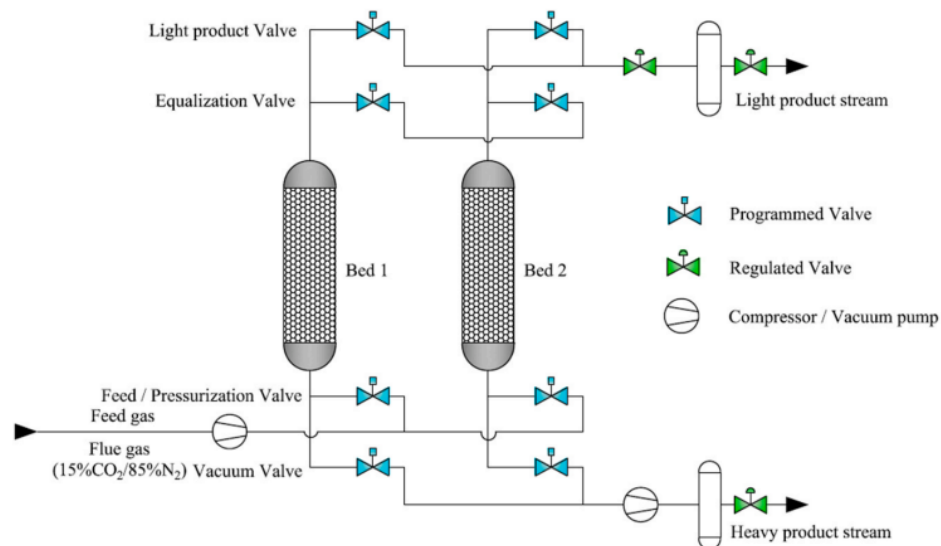


Figura 3.7: Diagrama esquemático del proceso VSA de dos lechos [38].

### 3.3.4 Adsorción por oscilación de temperatura al vacío (TVSA)

La adsorción por oscilación de temperatura y vacío (TVSA) es un proceso avanzado para la captura de  $\text{CO}_2$ , particularmente relevante en tecnologías de captura directa de aire (DAC). Este método combina el uso de calor y vacío para superar las fuerzas de adsorción de  $\text{CO}_2$  en los adsorbentes, permitiendo su regeneración eficiente. En comparación con técnicas más simples como la adsorción por oscilación de temperatura (TSA) o por vacío (VSA), la TVSA mejora significativamente la pureza del  $\text{CO}_2$  capturado, incluso desde concentraciones bajas como las presentes en el aire. El ciclo TVSA típico incluye cuatro etapas: adsorción, despresurización, evacuación y presurización con producto liviano, aplicando un incremento de temperatura durante la evacuación para optimizar la liberación del  $\text{CO}_2$ . Esta técnica ha demostrado ser eficaz al utilizar adsorbentes como zeolitas con una alta selectividad para  $\text{CO}_2$  y capacidades de carga mejoradas, siendo clave para lograr puridades superiores al 99.5% en un solo ciclo [39]. La Figura 3.8 muestra un diagrama esquemático del proceso de adsorción por TVSA en 4 pasos de operación. El incremento de temperatura se aplica principalmente durante la etapa de evacuación o desorción al vacío. En esta etapa, una vez que la presión del sistema ha sido reducida mediante vacío, se suministra calor al adsorbente para disminuir la afinidad entre el  $\text{CO}_2$  y la superficie adsorbente, facilitando la liberación del gas capturado. La combinación simultánea de baja presión y aumento de temperatura permite una regeneración más eficiente del material adsorbente en comparación con procesos que utilizan únicamente vacío o calentamiento.

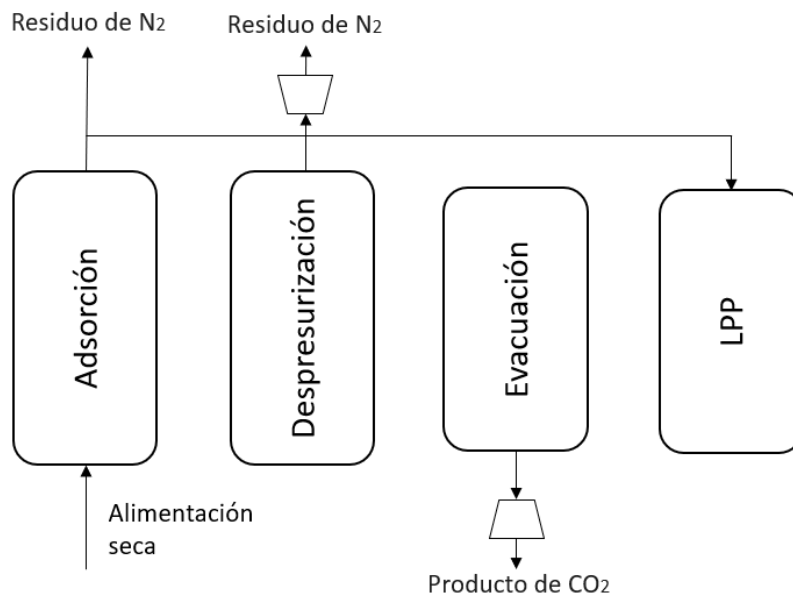


Figura 3.8: Diagrama esquemático junto con la representación gráfica de la temperatura y presión de un TVSA de 4 pasos [38].

## 3.4 Fundamentos de Adsorción de CO<sub>2</sub> en Carbón Activado

### 3.4.1 Principios de adsorción

La adsorción es un proceso fisicoquímico en el cual átomos, iones o moléculas presentes en una fase fluida se adhieren a la superficie de un material sólido, formando una capa en la interfaz sólido–fluido. A diferencia de la absorción, donde la transferencia de masa ocurre hacia el interior del volumen del material, la adsorción es un fenómeno superficial que involucra la migración de especies desde la fase gaseosa hacia los sitios activos disponibles en la superficie del sólido [20]. En el contexto de la captura de dióxido de carbono, este proceso describe la interacción del CO<sub>2</sub> con la superficie del carbón activado.

Desde el punto de vista termodinámico y cinético, la adsorción puede clasificarse en dos grandes categorías: fisisorción y quimisorción [40]. La fisisorción se origina a partir de interacciones débiles de tipo Van der Waals entre el adsorbato y el adsorbente. Este tipo de adsorción se caracteriza por ser reversible, no involucrar transferencia electrónica significativa y presentar calores de adsorción relativamente bajos. Estas características hacen que la fisisorción sea especialmente adecuada para aplicaciones donde se requiere una regeneración frecuente del adsorbente, como en procesos cíclicos de captura de CO<sub>2</sub> [40]. Por el contrario, la quimisorción implica la formación de enlaces químicos específicos entre el adsorbato y grupos funcionales de la superficie, con intercambio electrónico y mayores energías de enlace, lo que suele conducir a procesos parcialmente irreversibles y es más relevante en aplicaciones catalíticas [20, 41].

En aplicaciones como la Captura Directa de Aire (DAC), donde la concentración de CO<sub>2</sub> en la atmósfera es del orden de 400 ppm, la fisisorción juega un rol predominante debido a su menor requerimiento energético para la regeneración del material adsorbente [42]. No obstante, el comportamiento real del sistema adsorbente–adsorbato depende de una combinación de interacciones físicas y químicas, influenciadas por la naturaleza de la superficie del sólido y su estructura porosa.

### 3.4.2 Características fisicoquímicas del carbón activado

La superficie del carbón activado es altamente heterogénea y puede describirse como una combinación de planos basales grafiticos, de carácter mayoritariamente hidrofóbico, y una variedad de grupos

funcionales superficiales que confieren propiedades ácido–base al material. Estos grupos funcionales se localizan principalmente en los bordes y defectos de los microcristales grafiticos, donde la desorganización estructural genera valencias residuales insaturadas que actúan como sitios activos [43]. En la Figura 3.9 la microscopía del carbón donde se observan los sitios activos y en la Figura 3.10 los principales grupos funcionales del carbón activado.

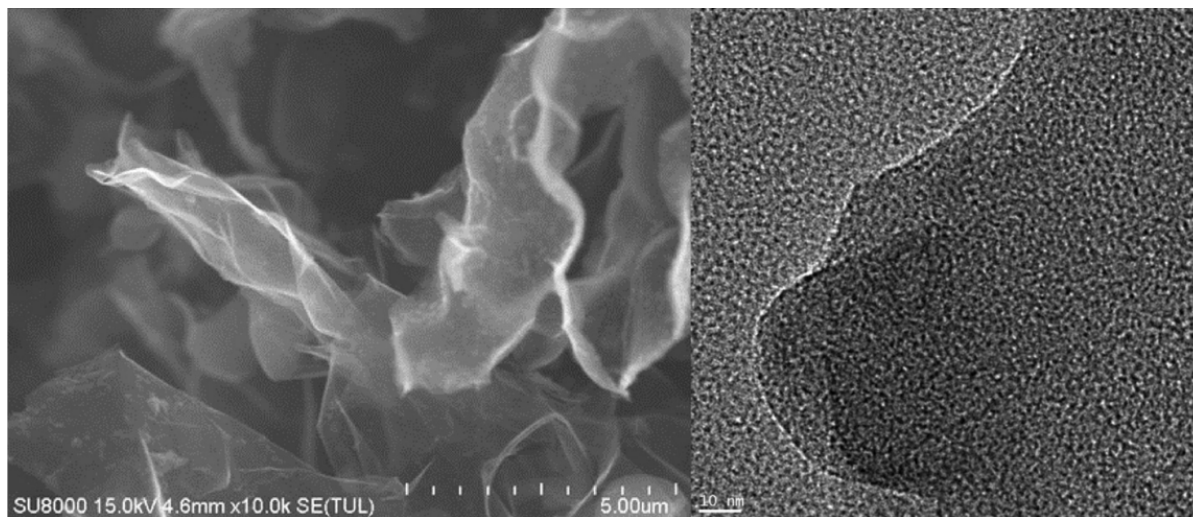


Figura 3.9: Imágenes de microscopía electrónica de barrido (SEM) y transmisión (TEM) de carbón activado, que evidencian una morfología irregular con partículas tipo lámina y una estructura altamente porosa con canales bien definidos, adaptado de [43].

El carácter ácido del carbón activado se asocia generalmente a la presencia de grupos oxigenados tales como carboxilos, lactonas y fenoles, mientras que el carácter básico se relaciona con moléculas funcionales como pironas y cromenos [44]. Adicionalmente, diversos autores han atribuido la basicidad superficial de ciertos carbones activados a la presencia de centros básicos de Lewis originados por electrones  $\pi$  deslocalizados en los anillos aromáticos grafiticos, incluso en materiales con bajo contenido de oxígeno superficial. Esta basicidad resulta particularmente relevante para la captura de  $\text{CO}_2$ , ya que esta molécula presenta un comportamiento ácido débil, favoreciendo interacciones ácido–base con superficies de carácter básico [44].

Desde el punto de vista estructural, el carbón activado presenta una microestructura altamente desordenada, conocida como estructura turbostrática, formada por microcristales grafiticos similares al grafito en dos dimensiones, pero sin un ordenamiento regular en la dirección perpendicular a los planos basales [43]. Esta falta de orden se manifiesta experimentalmente en imágenes de microscopía electrónica (Figura 3.9), donde se observan partículas de morfología irregular tipo lámina, con bordes definidos y una disposición no uniforme, así como una red de poros y canales distribuidos de manera heterogénea. Esta disposición genera una extensa red de espacios vacíos

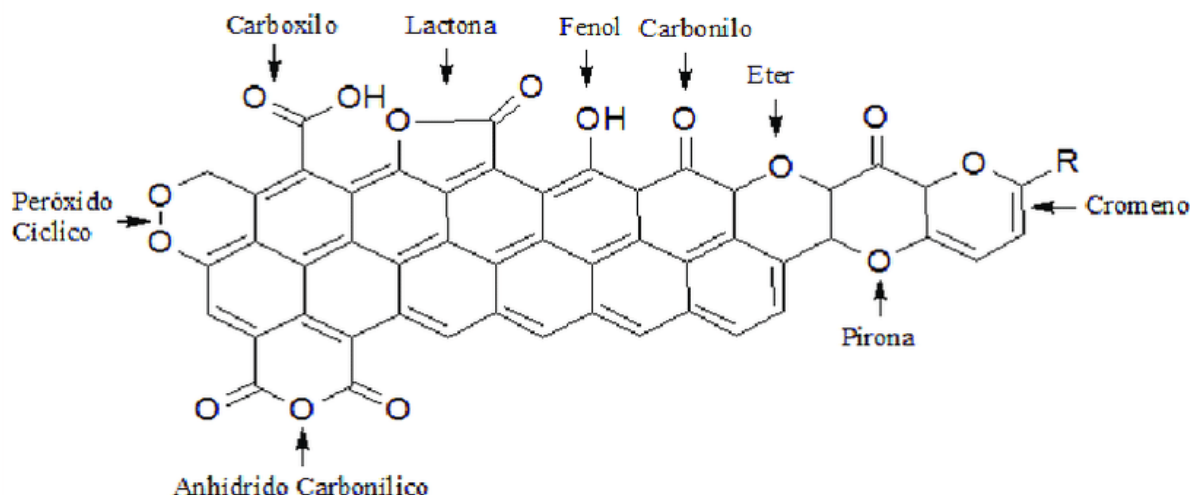


Figura 3.10: Representación esquemática de los principales grupos funcionales superficiales presentes en un carbón activado [44].

entre los microcristales, responsables de la elevada porosidad característica de estos materiales [43].

De acuerdo con la clasificación de la IUPAC, los poros se agrupan según su anchura en microporos ( $a < 20 \text{ \AA}$ ), mesoporos ( $20 < a < 500 \text{ \AA}$ ) y macroporos ( $a > 500 \text{ \AA}$ ). Dentro de los microporos, se distingue además entre microporos propiamente dichos ( $a < 7\text{--}8 \text{ \AA}$ ) y supermicroporos ( $8 < a < 15\text{--}20 \text{ \AA}$ ). En esta estructura jerárquica, los macroporos actúan como poros de admisión, los mesoporos como vías de difusión y los microporos como los principales sitios de adsorción [46].

Los microporos son los principales responsables del área superficial del carbón activado y constituyen los sitios donde ocurre la adsorción de  $\text{CO}_2$ . No obstante, su efectividad depende de la relación entre el tamaño del poro y el del adsorbato. En el caso del  $\text{CO}_2$  (diámetro cinético  $\sim 3.3 \text{ \AA}$ ), los supermicroporos ( $8\text{--}15 \text{ \AA}$ ) resultan más adecuados, ya que maximizan la interacción con las paredes del poro sin restringir el acceso [43]. Poros demasiado pequeños limitan la difusión, mientras que poros mayores, como los mesoporos, favorecen el transporte pero presentan menor capacidad de adsorción. En este sentido, una estructura jerárquica óptima combina microporos como sitios activos de adsorción y mesoporos como vías de transporte, mientras que los macroporos contribuyen principalmente a la distribución del flujo [45].

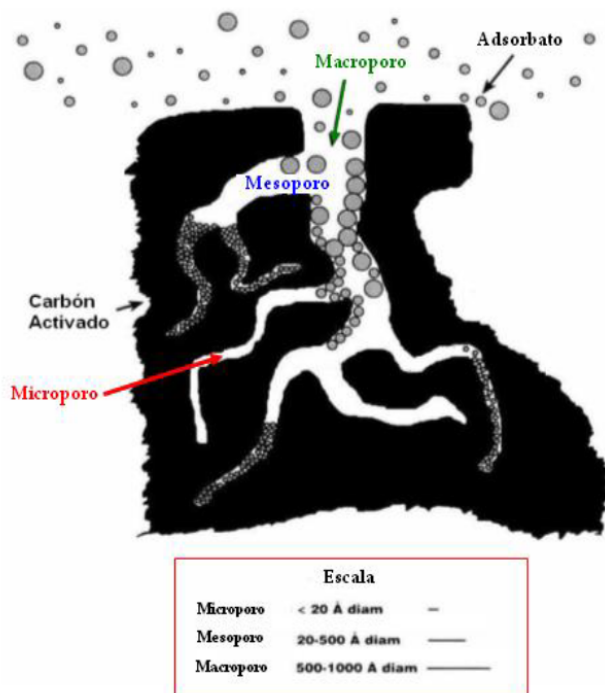


Figura 3.11: Estructura porosa esquematizada de un carbón activado, mostrando la jerarquía de macroporos, mesoporos y microporos [45].

### 3.4.3 Carbón activado de cáscara de coco

La cáscara de coco constituye uno de los precursores vegetales más atractivos para la obtención de carbón activado, debido a su alta disponibilidad, elevado contenido de carbono fijo y bajo porcentaje de cenizas. Este residuo corresponde al endocarpio duro del fruto del cocotero (*Cocos nucifera*), una especie ampliamente cultivada en regiones tropicales y subtropicales. La producción intensiva de coco genera grandes volúmenes de cáscara, la cual ha sido tradicionalmente empleada como combustible o material de bajo valor agregado, lo que refuerza su potencial como materia prima para aplicaciones avanzadas [45].

La preparación del carbón activado a partir de cáscara de coco se basa generalmente en dos etapas principales: la carbonización y la activación. Durante la carbonización, el material precursor es sometido a un tratamiento térmico en atmósfera inerte, provocando la eliminación de compuestos volátiles y el enriquecimiento progresivo del sólido en carbono. Como resultado, se forma una estructura carbonosa desordenada, compuesta por dominios aromáticos similares a capas grafénicas, con una porosidad inicial aún limitada y baja capacidad de adsorción [43].

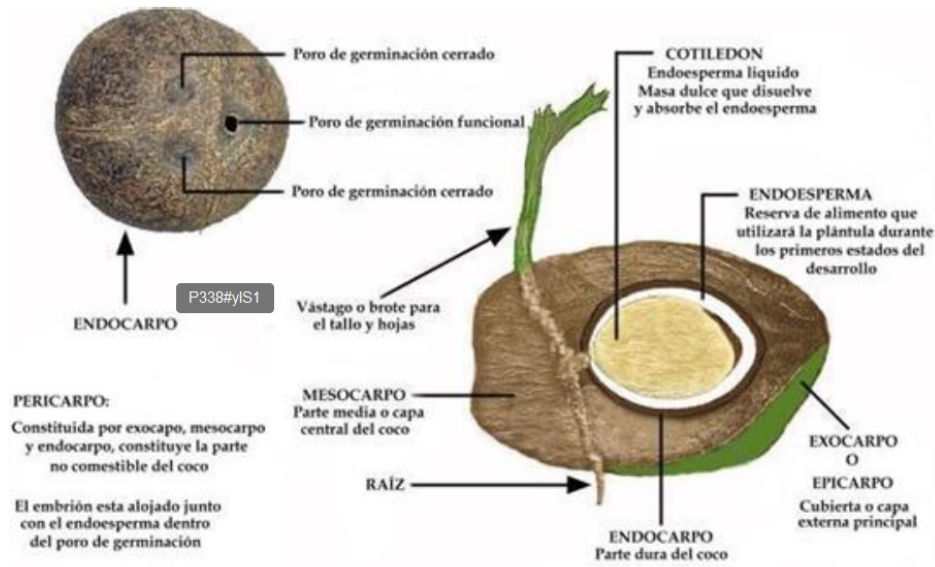


Figura 3.12: Composición del coco [45]

Para desarrollar una red porosa altamente accesible y maximizar la capacidad adsorbente, el material carbonizado debe ser posteriormente activado. Este proceso puede llevarse a cabo mediante activación física o química. En la activación física, el carbón se trata a altas temperaturas en presencia de agentes gaseosos como vapor de agua o dióxido de carbono, promoviendo la eliminación del carbono desorganizado y la apertura progresiva de poros. En contraste, la activación química implica la impregnación previa del precursor con agentes activantes, lo que permite inhibir la formación de alquitrans y favorecer el desarrollo de la porosidad durante el tratamiento térmico [21].

La elección del método de activación influye directamente en las propiedades texturales y químicas del carbón activado obtenido, determinando su área superficial, distribución de tamaños de poro y naturaleza de los grupos funcionales superficiales. En particular, los carbones activados derivados de cáscara de coco suelen presentar una estructura predominantemente microporosa, adecuada para la adsorción de moléculas pequeñas como el dióxido de carbono, lo que los posiciona como materiales prometedores para aplicaciones de captura de CO<sub>2</sub> [45].

## 3.5 Caracterización Física del Carbón Activado

### 3.5.1 Caracterización textural mediante adsorción de $N_2$ (BET)

La caracterización textural de sólidos porosos, como el carbón activado, se basa principalmente en la evaluación de tres parámetros fundamentales: el área superficial específica, el volumen de poros y la distribución de tamaño de poro. En este tipo de materiales, la superficie interna asociada a las paredes de los poros es considerablemente mayor que la superficie externa, siendo la principal responsable de los fenómenos de adsorción [45].

Una de las técnicas más utilizadas para la caracterización textural es la adsorción física de gases, particularmente nitrógeno ( $N_2$ ) a 77 K. Este método se fundamenta en la interacción física entre el adsorbato y la superficie del sólido, gobernada por fuerzas de Van der Waals, sin formación de enlaces químicos. Al establecerse un equilibrio dinámico entre el gas en fase libre y el gas adsorbido, es posible obtener isothermas de adsorción que describen la cantidad de gas adsorbido en función de la presión relativa [45]. La obtención de la isoterma de adsorción de  $N_2$  a 77 K constituye la etapa inicial del análisis textural, ya que permite determinar simultáneamente el área superficial específica del sólido, su porosidad y la distribución de poros mediante la aplicación de modelos matemáticos adecuados. En particular, el método de Brunauer–Emmett–Teller (BET) es ampliamente aceptado como un procedimiento estándar para la determinación del área superficial específica de materiales porosos [45]. La forma de la isoterma de adsorción proporciona información cualitativa relevante sobre el mecanismo de adsorción y la estructura porosa del material. En el caso del carbón activado, las isothermas suelen corresponder al tipo I según la clasificación de Brunauer, Deming, Deming y Teller (BDDT), característica de sólidos predominantemente microporosos, presentando una elevada adsorción a bajas presiones relativas seguida de una meseta asociada al llenado de los microporos [45].

En la Tabla 3.3 se presenta una revisión bibliográfica de trabajos previos que reportan la preparación de carbón activado a partir de cáscara de coco mediante activación física, química y combinada, junto con las áreas superficiales específicas obtenidas. Los resultados evidencian que los métodos de activación física con  $CO_2$  o vapor de agua, así como la activación química con agentes alcalinos, pueden conducir a materiales altamente microporosos, con valores de área BET que superan los  $1000\text{ m}^2\text{ g}^{-1}$ , confirmando la idoneidad de este precursor para aplicaciones de adsorción.

Tabla 3.3: Revisión bibliográfica de los métodos empleados en la preparación de carbón activado a partir de cáscara de coco (CC) [45].

| Método         | Agente de activación                                                                                          | Impregnación %/T(°C)/t(h) | Carbonización T(°C)/t(h) | Activación T(°C)/t(h) | Área BET (m <sup>2</sup> /g) | Ref. |
|----------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------|--------------------------|-----------------------|------------------------------|------|
| Física         | CO <sub>2</sub>                                                                                               | –                         | –                        | 800, 1                | 720                          | [47] |
| Química/Física | KCl, KNO <sub>3</sub> , KOH, K <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> , K <sub>3</sub> PO <sub>4</sub> /CO <sub>2</sub> | 5.5; 70                   | –                        | –                     | 400–1550                     | [48] |
| Física         | CO <sub>2</sub>                                                                                               | –                         | –                        | 800                   | –                            | [48] |
| Química/Física | KOH/CO <sub>2</sub> , H <sub>3</sub> PO <sub>4</sub> /CO <sub>2</sub>                                         | 5.5 / 3.0                 | –                        | –                     | 751–1360                     | [49] |
| Química        | KOH                                                                                                           | 0.25–0.75                 | 400–800, 1-3             | –                     | 245–1186                     | [49] |
| Física         | CO <sub>2</sub>                                                                                               | –                         | 900, 1                   | 900, 1–1.5            | 350–1800                     | [50] |
| Pirólisis      | N <sub>2</sub>                                                                                                | –                         | 250–850, 1               | –                     | 663                          | [51] |
| Física         | O <sub>2</sub> (aire)                                                                                         | –                         | –                        | 800                   | 700                          | [51] |
| Física         | H <sub>2</sub> O (vapor)                                                                                      | –                         | –                        | 900, 0.5              | 2114                         | [52] |
| Química        | ZnCl <sub>2</sub>                                                                                             | 1:1, 80, 14               | 500, 3                   | –                     | 266                          | [52] |
| Física         | H <sub>2</sub> O (vapor)                                                                                      | –                         | –                        | 1000                  | –                            | [53] |
| Química/Física | KOH/CO <sub>2</sub>                                                                                           | 1:1, 110, 12              | 700, 1                   | 850, 2                | 1026                         | [54] |
| Física         | CO <sub>2</sub>                                                                                               | –                         | –                        | 900, 1                | 1667                         | [55] |
| Física         | CO <sub>2</sub>                                                                                               | –                         | –                        | 900, 1.5              | 2000                         | [56] |
| Química        | NaOH                                                                                                          | 1:1–3:1                   | 130–500, 1–2             | –                     | 783–2825                     | [57] |

### 3.5.2 Isotermas de adsorción

En el campo de la adsorción, varios modelos de isotermas se han desarrollado para describir cómo los gases o vapores se adsorben en superficies sólidas. Estos modelos resultan fundamentales para predecir el comportamiento de los adsorbentes bajo diferentes condiciones operativas, teniendo cada uno sus propias ventajas y limitaciones en función de las características específicas del sistema de adsorción. La isoterma de Langmuir es un modelo que asume sitios de adsorción equivalentes y monocapa sin interacciones entre moléculas. La teoría BET extiende este concepto para adsorción en múltiples capas, útil para superficies porosas y cálculo de superficie específica. El modelo Freundlich es empírico y describe adsorción en superficies heterogéneas con sitios de diferente energía. Otros modelos, como Toth y Dubinin-Radushkevich, abordan sistemas más complejos y no ideales, ajustándose a datos experimentales y factores como la ley de Henry y límites de saturación [58]. La Tabla 3.4 presenta un resumen de los principales modelos de isotermas de adsorción, sus

tipos, así como sus ventajas y desventajas en el contexto de la adsorción en monolitos [58].

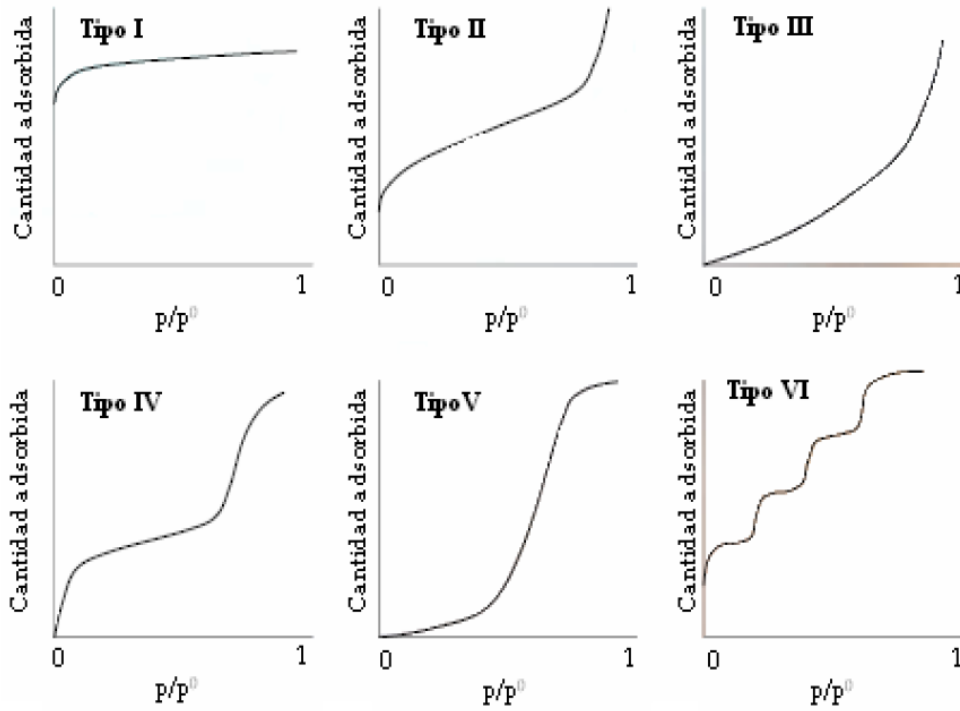


Figura 3.13: Representación gráfica en diagrama  $q$  vs  $p$  de distintos tipos de isothermas de adsorción para sistemas gas-sólido [59].

La Figura 3.13 muestra diversos tipos de isothermas de adsorción bajo distintas condiciones de presión relativa [60]:

- (I) Adsorción en monocapa sobre una superficie relativamente homogénea, característica del modelo de Langmuir.
- (II) Adsorción multicapa, donde luego de completarse la primera capa adsorbida continúan formándose capas adicionales de moléculas sobre la superficie.
- (III) Adsorción multicapa con interacciones adsorbato-adsorbato más débiles, generalmente asociada a superficies con menor afinidad inicial.
- (IV) Adsorción multicapa con condensación capilar en mesoporos, presentando histéresis entre adsorción y desorción.
- (V) Similar al tipo IV, pero con condensación capilar más pronunciada debido a estructuras porosas complejas.

(VI) Adsorción multicapa sobre superficies no porosas o macroporosas uniformes.

Tabla 3.4: Resumen de modelos de isothermas de adsorción y métodos de transferencia de masa para monolitos adsorbentes [58].

| Modelo                                     | Tipo          | Ventajas                                                                                                                                       | Desventajas                                                                                                            |
|--------------------------------------------|---------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>Langmuir</b>                            | Teórico       | Consistente con la termodinámica a bajas cargas. Fácil de implementar en simulaciones computacionales.                                         | Suposiciones limitadas. Base poco robusta.                                                                             |
| <b>Freundlich</b>                          | Empírico      | Muy útil para ajustar datos experimentales. Simple de aplicar.                                                                                 | Sin límite de ley de Henry a bajas concentraciones. No hay saturación alta.                                            |
| <b>Brunauer Emmett Teller (BET)</b>        | Semi-empírico | Considera la adsorción en multicapas, útil en sistemas complejos. Fácil de aplicar.                                                            | Aplicable solo en un rango de presión relativa de 0.05 a 0.3. Sin límite de saturación.                                |
| <b>Modified BET</b>                        | Semi-empírico | Similar a BET pero extendido para cubrir todo el rango de presiones relativas. Aplicable en todo el espectro.                                  | Mantiene limitaciones de BET. Sin límite de saturación.                                                                |
| <b>Toth</b>                                | Empírico      | Integra ley de Henry y saturación. Preciso en simulaciones.                                                                                    | Puede volverse inexacto a presiones moderadas, especialmente cuando se requiere precisión en aplicaciones específicas. |
| <b>Dubinin Radushkevich (DR)</b>           | Semi-empírico | Firme base termodinámica. Preciso a medias y altas concentraciones.                                                                            | Termodinámicamente poco fiable a bajas cargas, limitando su uso en aplicaciones de bajas concentraciones.              |
| <b>Dubinin Astakhov (DA)</b>               | Semi-empírico | Más flexible que DR. Preciso a medias y altas concentraciones.                                                                                 | Poco fiable a bajas cargas.                                                                                            |
| <b>Modified Dubinin Radushkevich (MDR)</b> | Semi-empírico | Consistencia termodinámica a bajas cargas, manteniendo la precisión a lo largo de todo el espectro de concentración. Preciso en todo el rango. | Parámetros sin significado físico.                                                                                     |

A continuación, se describen en detalle los modelos matemáticos de las isothermas de Langmuir, Freundlich, y BET al ser isothermas ampliamente utilizadas para describir la adsorción de CO<sub>2</sub> en materiales porosos.

- **Isoterma de Langmuir:** Describe la adsorción en superficies homogéneas bajo el supuesto de monocapa, siendo adecuada para adsorbentes como el carbón activado. Su expresión es:

$$q = \frac{q_{\max} \cdot b \cdot C}{1 + b \cdot C} \quad (3.1)$$

donde  $q$  es la cantidad adsorbida,  $q_{\max}$  es la capacidad máxima de adsorción,  $b$  es la constante de afinidad de Langmuir, y  $C$  es la concentración de  $\text{CO}_2$ .

- **Isoterma de Freundlich:** Modelo empírico que describe la adsorción en superficies heterogéneas. Es útil para sistemas donde los sitios de adsorción tienen diferentes energías. Su ecuación es:

$$q = K_F \cdot C^{\frac{1}{n}} \quad (3.2)$$

donde  $K_F$  es la constante de Freundlich y  $n$  describe la intensidad de la adsorción.

- **Modelo BET (Brunauer, Emmett y Teller):** El modelo BET extiende la teoría cinética de adsorción de Langmuir para describir la adsorción en multicapas sobre superficies sólidas. Este modelo relaciona el volumen de gas adsorbido con la presión relativa de equilibrio  $p/p_0$ , y se expresa como:

$$\frac{p/p_0}{V(1 - p/p_0)} = \frac{1}{V_m C} + \frac{C - 1}{V_m C} \left( \frac{p}{p_0} \right) \quad (3.3)$$

donde  $p$  es la presión de equilibrio del adsorbato,  $p_0$  es la presión de saturación a la temperatura de trabajo,  $V$  es el volumen de gas adsorbido,  $V_m$  corresponde al volumen necesario para formar una monocapa completa sobre la superficie del sólido, y  $C$  es una constante relacionada con la energía de interacción adsorbato–adsorbente. El ajuste de esta ecuación en el rango  $0,05 < p/p_0 < 0,30$  permite determinar el área superficial específica del material.

- **Modelo de Toth:** El modelo de Toth es una isoterma semiempírica desarrollada para describir la adsorción en superficies energéticamente heterogéneas. Este modelo es ampliamente utilizado para ajustar datos experimentales de adsorción de gases como  $\text{CO}_2$  y  $\text{N}_2$  sobre materiales microporosos, como los carbones activados. Se expresa como:

$$q = \frac{q_s b P}{[1 + (bP)^t]^{1/t}} \quad (3.4)$$

donde  $q$  representa la cantidad adsorbida en equilibrio (por ejemplo, mmol/g o mol/kg),  $q_s$  es la capacidad máxima de adsorción del sólido,  $b$  es la constante de afinidad de adsorción relacionada con la energía de interacción adsorbato–adsorbente,  $P$  es la presión de equilibrio

del adsorbato, y  $t$  es el parámetro de Toth, asociado al grado de heterogeneidad de la superficie del adsorbente.

Cada una de estas isothermas tiene aplicaciones específicas dependiendo de las características del material adsorbente y las condiciones operacionales.

### 3.5.3 Curvas de ruptura

En sistemas de lecho fijo para la captura de  $\text{CO}_2$ , la curva de ruptura es una herramienta fundamental para evaluar el desempeño del material adsorbente. Esta se define como la representación gráfica de la concentración de  $\text{CO}_2$  en la corriente de salida del lecho de adsorción en función del tiempo o del volumen total de gas que ha pasado por el lecho [61].

Una curva de ruptura típica muestra una forma de “S”, la cual puede dividirse en tres zonas distintas tal como se observa en la Figura 3.14 [61]. Inicialmente, en la zona limpia, la concentración de  $\text{CO}_2$  en el efluente es prácticamente cero, indicando que el carbón activado en la entrada está adsorbiendo eficazmente todas las moléculas entrantes. A medida que el gas continúa fluyendo, el adsorbente cerca de la entrada comienza a saturarse, y la concentración de  $\text{CO}_2$  en el efluente aumenta, formando la llamada zona de transferencia de masa o zona de adsorción. Finalmente, en la zona de saturación o agotamiento, la concentración de  $\text{CO}_2$  en el efluente se aproxima a la concentración de entrada, lo que indica que el lecho está prácticamente saturado y ya no captura más  $\text{CO}_2$  de manera efectiva. Las zonas de cada etapa de la curva de ruptura se muestran en la Figura 3.14.

De esta curva se pueden derivar parámetros clave. El tiempo de ruptura ( $t_b$ ) corresponde al instante en que la concentración en el efluente alcanza un valor predeterminado bajo (por ejemplo, 1–5% de la concentración de entrada). Este valor representa la vida útil operativa del lecho antes de requerir regeneración. El tiempo de saturación ( $t_s$ ) se define como el momento en que la concentración de  $\text{CO}_2$  en la salida alcanza el 95–99% de la concentración de entrada. La capacidad de adsorción ( $q_t$ ) hasta  $t_b$  o  $t_s$  se calcula como el área bajo la curva [63]. La longitud de la zona de transferencia de masa (MTZ) representa la región del lecho donde ocurre la mayor parte de la adsorción. Una curva de ruptura más empinada indica una MTZ más corta y, por tanto, una mayor eficiencia de uso del adsorbente. La eficiencia de la columna también se puede evaluar mediante la pendiente y forma de esta curva [64].

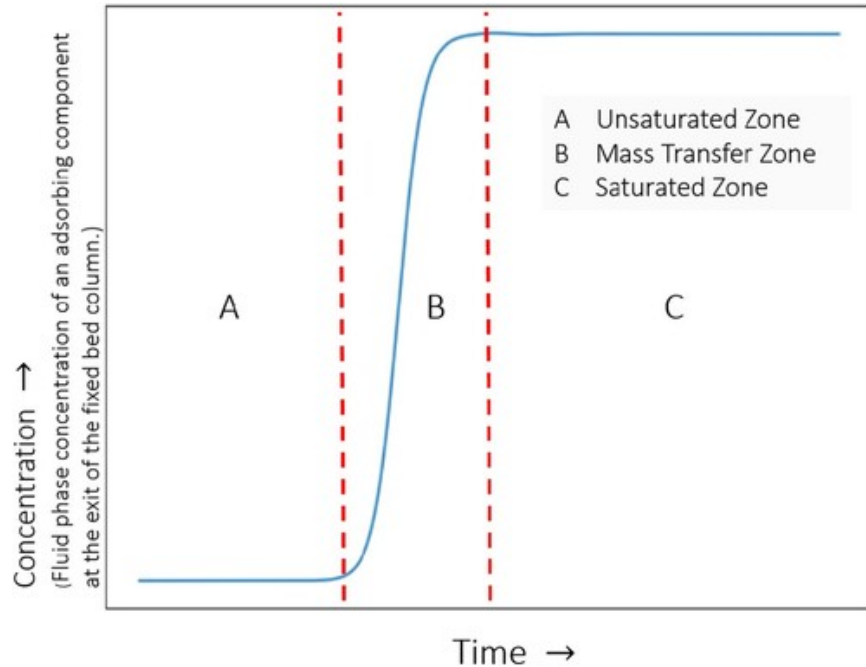


Figura 3.14: Zonas diferenciadas en una curva de ruptura a la salida de una columna de lecho fijo [62]

Las propiedades de la curva de ruptura están influenciadas por diversos factores, entre ellos las características del carbón activado (tipo, área superficial, distribución de tamaño de poro, química superficial), condiciones operativas (temperatura, presión, velocidad superficial del gas, concentración de entrada de  $\text{CO}_2$ ), así como las características del lecho (altura, tamaño y forma de los pellets, densidad de empaque y fracción vacía) [61]. La forma sigmoideal clásica de la curva de ruptura se observa principalmente en sistemas continuos de lecho fijo bajo flujo constante y condiciones relativamente estacionarias. En sistemas batch o semi-batch, como los utilizados parcialmente en este trabajo, donde el volumen de aire es finito y la concentración de  $\text{CO}_2$  disminuye progresivamente con el tiempo, las curvas pueden presentar comportamientos más suaves o asintóticos en lugar de una transición sigmoideal bien definida. En estos casos, la evolución temporal de la concentración depende no solo de la saturación del adsorbente, sino también del agotamiento progresivo de  $\text{CO}_2$  disponible en el volumen de aire confinado, modificando la forma típica de la curva de ruptura observada en sistemas continuos.

### 3.5.4 pH de carga cero

El pH de carga cero ( $\text{pH}_{\text{PZC}}$ ) corresponde al valor de pH en el cual la superficie de un sólido presenta una carga neta nula. A este pH, las cargas positivas y negativas superficiales se encuentran en equilibrio, mientras que a valores de pH inferiores o superiores al  $\text{pH}_{\text{PZC}}$  la superficie adquiere un carácter netamente positivo o negativo, respectivamente. Este parámetro constituye una propiedad fundamental de la química superficial de materiales adsorbentes, ya que condiciona las interacciones electrostáticas y ácido-base entre el sólido y las especies presentes en el medio. La determinación del  $\text{pH}_{\text{PZC}}$  se realiza comúnmente mediante el método del ajuste de pH inicial, el cual consiste en poner en contacto el adsorbente con soluciones acuosas de distinto pH inicial y medir el pH final una vez alcanzado el equilibrio sólido-líquido. El valor del  $\text{pH}_{\text{PZC}}$  se obtiene gráficamente como el punto de intersección entre la curva de pH final en función del pH inicial y la recta  $\text{pH}_{\text{final}} = \text{pH}_{\text{inicial}}$  [45].

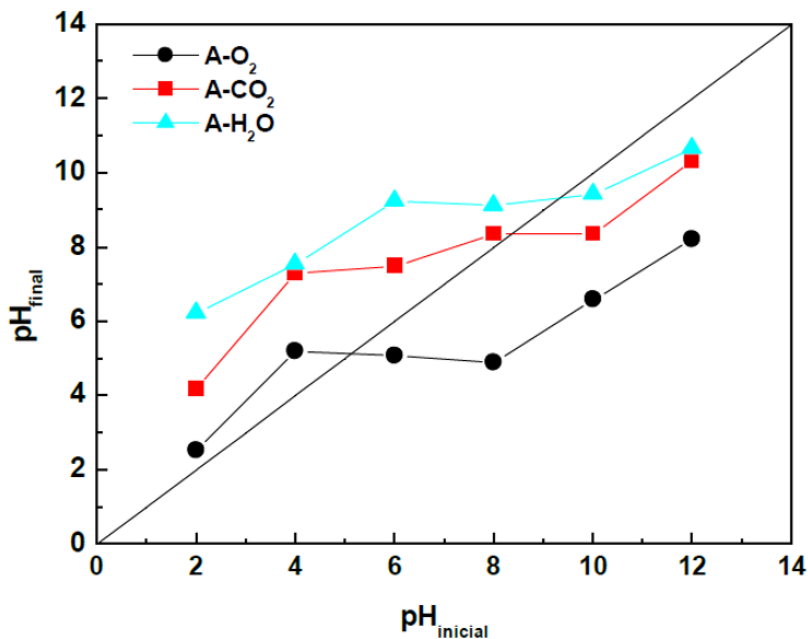


Figura 3.15: Curva esperada para la determinación del  $\text{pH}_{\text{PZC}}$  de un carbón activado de cáscara de coco activado físicamente con vapor de agua. El  $\text{pH}_{\text{PZC}}$  se identifica como el punto de intersección entre la curva  $\text{pH}_{\text{final}}$  vs.  $\text{pH}_{\text{inicial}}$  y la recta  $\text{pH}_{\text{final}} = \text{pH}_{\text{inicial}}$  [45].

En el caso del carbón activado, el valor del  $\text{pH}_{\text{PZC}}$  está relacionado con el método de activación empleado y con la naturaleza de los grupos funcionales presentes en la superficie. De acuerdo con la literatura, los carbones activados físicamente con dióxido de carbono y vapor de agua presentan valores de  $\text{pH}_{\text{PZC}}$  superiores a 7 como se puede observar en la Figura 3.15, mientras que aquellos activados con aire exhiben valores ligeramente inferiores a la neutralidad, reflejando un carácter superficial más ácido [45].

El comportamiento básico observado en los carbones activados con vapor y  $\text{CO}_2$  se atribuye a la presencia de estructuras carbonílicas tipo pirona ( $\text{C}=\text{O}$ ), electrones  $\pi$  asociados a las capas grafénicas, heteroátomos y especies inorgánicas residuales, así como a un mayor contenido de enlaces  $\text{C}-\text{O}$  estables. El valor del  $\text{pH}_{\text{PZC}}$  refleja, por tanto, el balance entre grupos funcionales ácidos y básicos desarrollados durante el proceso de activación. Dado que el carbón activado utilizado en este trabajo fue obtenido mediante activación física con vapor de agua, se espera un comportamiento superficial similar al reportado para la muestra A- $\text{H}_2\text{O}$  en la literatura, presentando un  $\text{pH}_{\text{PZC}}$  mayor que 7 [45]. Este carácter superficial predominantemente básico resulta favorable para la captura de dióxido de carbono, considerando que el  $\text{CO}_2$  se comporta como un ácido débil en solución acuosa, favoreciendo interacciones ácido-base superficiales con los sitios básicos del adsorbente y contribuyendo a una mayor afinidad del adsorbente por el  $\text{CO}_2$ , especialmente en procesos donde la adsorción se ve influenciada por la química superficial además de la textura porosa.

El dióxido de carbono se comporta como un ácido débil en medio acuoso, de acuerdo con los siguientes equilibrios:



En consecuencia, el  $\text{CO}_2$  tiende a liberar protones en solución acuosa, aunque de manera débil.

### 3.6 Pellets Monolíticos para Adsorción de $\text{CO}_2$

Los monolitos son materiales estructurados caracterizados por una estructura tipo panal de abejas, compuesta por numerosos canales paralelos [65]. Estas estructuras se utilizan ampliamente como soporte de catalizadores en diversas aplicaciones debido a su capacidad para facilitar altos caudales de gas con una mínima caída de presión [66]. Los monolitos de carbón activado, donde el material adsorbente adopta esta forma estructurada, ofrecen varias ventajas potenciales para la captura directa de  $\text{CO}_2$  del aire (DAC).

En la etapa de adsorción, una distribución de temperatura más uniforme evita la formación de puntos calientes dentro del lecho, lo cual es fundamental porque la adsorción de  $\text{CO}_2$  es un proceso exotérmico. Si la temperatura aumenta localmente, la capacidad de adsorción disminuye de manera significativa debido a la naturaleza termodinámicamente desfavorable de la adsorción a mayor temperatura. Al mantener un perfil térmico homogéneo, los monolitos permiten que el

adsorbente opere más cerca de su capacidad máxima a lo largo de toda su longitud, mejorando tanto la eficiencia como el tiempo de saturación del lecho. Durante la regeneración, una mejor transferencia de calor facilita la aplicación uniforme de la energía necesaria para desorber el  $\text{CO}_2$ . En procesos como TSA (Temperature Swing Adsorption), VTSA (Vacuum–Temperature Swing Adsorption) o ESA (Electrically Swing Adsorption), esta uniformidad térmica reduce los tiempos de calentamiento y evita zonas infraregeneradas o sobregeneradas [67]. Esto no solo mejora la pureza del gas recuperado, sino que también reduce la energía total requerida por ciclo, permitiendo una regeneración más rápida, controlada y energéticamente eficiente.

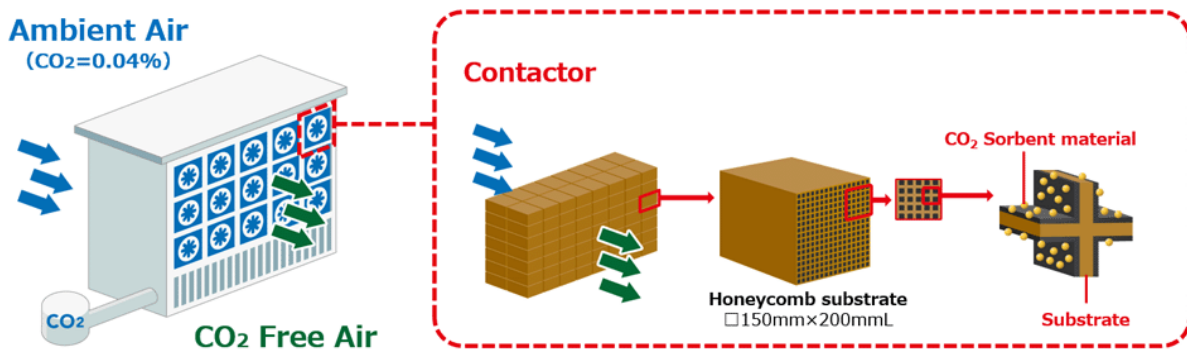


Figura 3.16: Captura de carbono DAC mediante contactores monolíticos [68].

Los monolitos adsorbentes pueden fabricarse mediante distintas estrategias dependiendo de si la estructura completa corresponde al material adsorbente o si este se deposita sobre un soporte estructural. Una de las técnicas más utilizadas para fabricar monolitos integrales de carbón activado es la extrusión, donde el precursor carbonoso o el polvo de carbón activado se mezcla con aglutinantes y posteriormente se fuerza a través de una matriz para obtener estructuras tipo panal con múltiples canales paralelos [69]. Este método permite obtener estructuras monolíticas auto-soportadas con baja caída de presión y buena resistencia mecánica.

Por otro lado, el método de *washcoating* consiste en depositar una capa delgada de material adsorbente sobre un sustrato monolítico preformado, generalmente cerámico. En este caso, el adsorbente no constituye la estructura completa del monolito, sino únicamente un recubrimiento superficial adherido a las paredes internas de los canales [70]. Esta configuración permite reducir resistencias difusivas y mejorar la transferencia de masa debido al menor espesor de la capa activa.

Más recientemente, técnicas de manufactura aditiva e impresión 3D han comenzado a utilizarse para fabricar monolitos adsorbentes con geometrías altamente controladas y complejas, permitiendo optimizar simultáneamente área superficial, distribución de flujo y caída de presión [71]. Además,

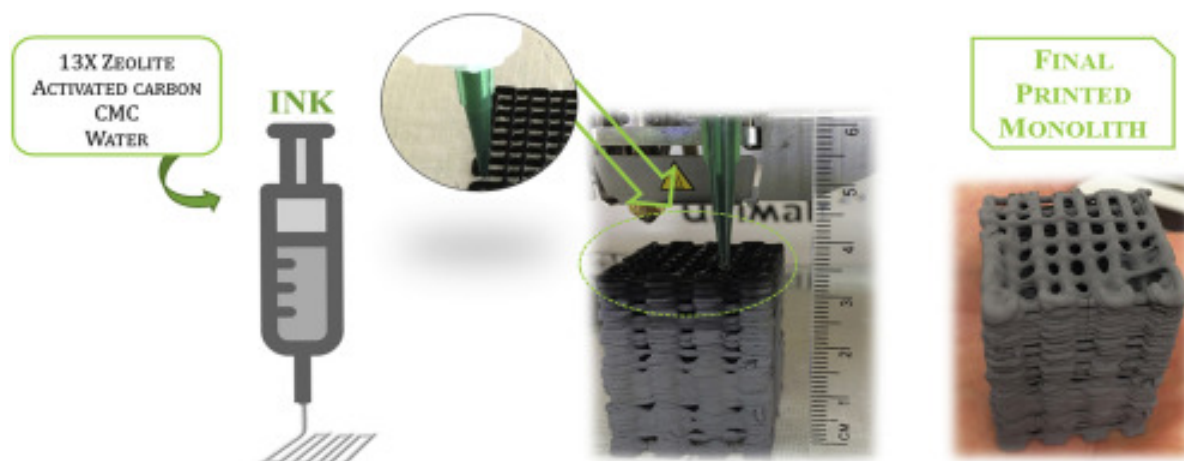


Figura 3.17: Elaboración de pellets monoliticos a partir de carbón activado, zeolita y CMC como aglutinante [73]

parámetros geométricos como la densidad de celdas, el espesor de pared y la geometría de los canales influyen directamente sobre la transferencia de masa y el desempeño de captura de  $\text{CO}_2$  [72].

La geometría estructurada de los monolitos de carbón activado influye directamente sobre los mecanismos de transferencia de masa involucrados en la adsorción de  $\text{CO}_2$ , afectando el comportamiento de las curvas de ruptura y el desempeño global del proceso DAC. En estos sistemas, el transporte de masa puede describirse mediante tres etapas principales: transferencia externa desde la fase gaseosa hacia la superficie del adsorbente, difusión intraparticular dentro de la estructura porosa del carbón activado y cinética de adsorción sobre los sitios activos [69]. La transferencia externa corresponde al transporte de moléculas de  $\text{CO}_2$  desde el aire contenido en los canales hacia las paredes adsorbentes del monolito. Esta etapa depende de parámetros geométricos como el tamaño de canal, la distribución del flujo y la densidad de celdas. Posteriormente, el  $\text{CO}_2$  debe difundirse a través de la red de microporos y mesoporos del carbón activado para alcanzar los sitios activos disponibles, proceso conocido como difusión intraparticular. En esta etapa, propiedades propias del adsorbente tales como la porosidad, distribución de tamaño de poro y conectividad de la red porosa influyen sobre la accesibilidad del adsorbato [72]. Finalmente, la cinética de adsorción describe la velocidad con la que las moléculas quedan retenidas una vez alcanzados los sitios activos del adsorbente.

A diferencia de los lechos empacados granulares, la estructura canalizada de los monolitos favorece una distribución más uniforme del flujo gaseoso, reduciendo fenómenos de canalización preferencial y disminuyendo la caída de presión [71]. Además, parámetros geométricos como el

espesor de pared y la densidad de celdas influyen significativamente sobre el desempeño adsorptivo. Paredes más delgadas disminuyen la distancia que debe recorrer el  $\text{CO}_2$  para acceder al volumen interno del adsorbente y pueden favorecer una utilización más rápida de la masa activa; sin embargo, espesores excesivamente bajos pueden comprometer la estabilidad mecánica durante la fabricación y manipulación del pellet [72]. Del mismo modo, un aumento en la densidad de celdas incrementa el área superficial geométrica disponible por unidad de volumen, aunque ello no garantiza necesariamente una mejora proporcional en la capacidad de captura observada experimentalmente. Por esta razón, el diseño óptimo de monolitos adsorbentes requiere un equilibrio entre área superficial accesible, cantidad efectiva de adsorbente y estabilidad estructural.

Comparar el rendimiento del carbón activado en forma de monolito con otras formas comunes de pellets, como los esféricos, cilíndricos y en forma de escama, proporciona información valiosa para seleccionar la configuración de adsorbente más adecuada para la captura directa de aire (DAC). En comparación con lechos empacados de pellets esféricos, los monolitos de carbón activado suelen presentar coeficientes de transferencia de masa más altos debido a caminos de difusión más cortos en sus paredes en comparación con el diámetro de los pellets esféricos [74]. Además, los monolitos generalmente exhiben caídas de presión significativamente menores, lo que permite un mayor caudal de aire, un factor crítico en DAC [75]. En la Figura 3.18 se muestra el control de la geometría interna de los pellets monolíticos, tamaño de canal y espesor de pared, además de geometría de canal (circular, cuadrada, tesleado, etc.).

La capacidad total de adsorción de  $\text{CO}_2$  por unidad de volumen del lecho puede ser menor en ciertos tipos de monolitos, como aquellos con recubrimientos delgados de carbón activado, en comparación con un lecho densamente empacado con pellets esféricos de alta capacidad [77]. Las curvas de ruptura obtenidas con monolitos pueden ser más pronunciadas debido a las mejores características de transferencia de masa, aunque el tiempo de ruptura dependerá en última instancia de la capacidad total de adsorción del monolito. Se esperan tendencias similares al comparar monolitos con pellets cilíndricos, con ventajas potenciales de los monolitos en términos de eficiencia de transferencia de masa y menor caída de presión. El rendimiento de los pellets cilíndricos también puede estar influenciado por su relación de aspecto (longitud/diámetro). Sin embargo, la comparación directa de sus curvas de ruptura con las de los monolitos no está claramente documentada. Si bien el espesor reducido de las escamas podría facilitar una difusión rápida en una dimensión, su disposición en el lecho adsorbente podría generar mayores caídas de presión en comparación con los canales bien definidos de un monolito. Las escamas pueden ofrecer una alta área superficial externa, pero su eficiencia de empaquetamiento y la fracción de vacío resultante podrían diferir considerablemente de la estructura de un monolito. La forma óptima del pellet

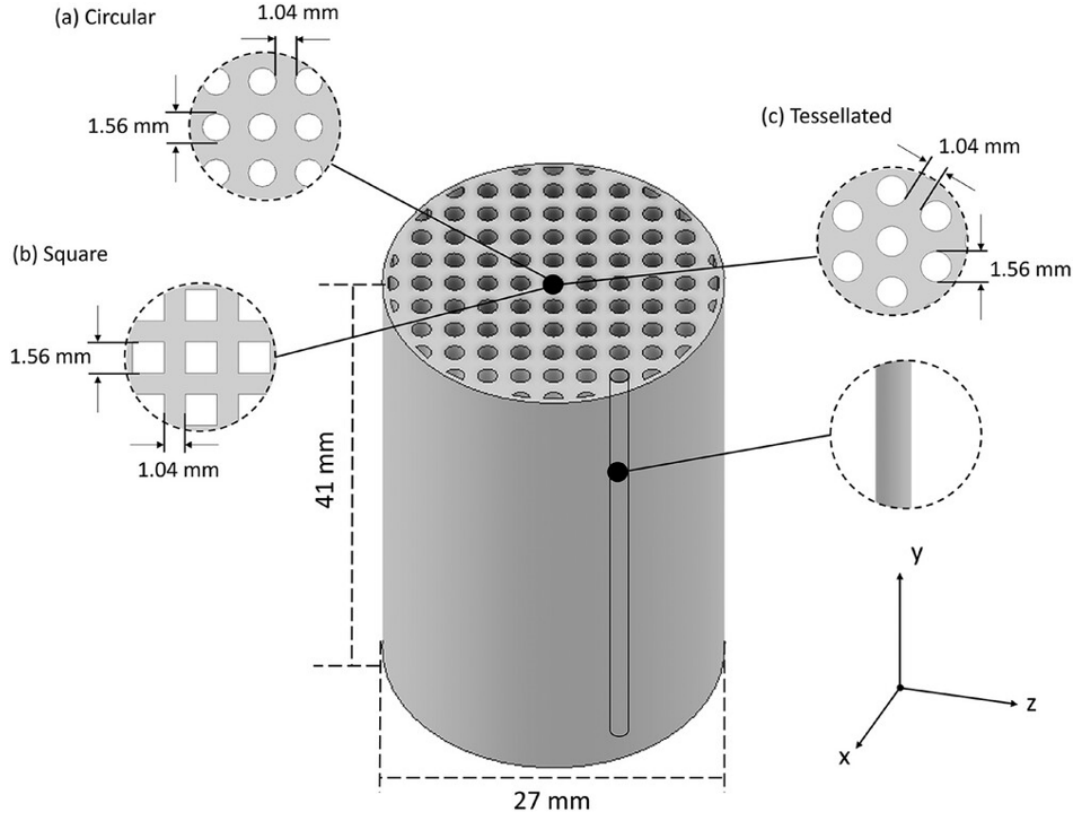


Figura 3.18: Diseños CAD para las microestructuras adsorbentes de geometría simple: a) circular, b) cuadrada y c) diseño de canales teselado [76].

para DAC dependerá probablemente de los requisitos específicos del sistema, incluyendo el caudal de aire deseado, el consumo energético para operación y regeneración, y la eficiencia general de captura de  $\text{CO}_2$ .

La captura de  $\text{CO}_2$  en monolitos de carbón activado involucra una serie de mecanismos consecutivos de transferencia de masa y adsorción que determinan el desempeño global del adsorbente. Antes de alcanzar los sitios activos disponibles dentro de la estructura porosa, las moléculas de  $\text{CO}_2$  deben transportarse desde el volumen de aire presente en la cámara experimental hacia la superficie del monolito y posteriormente difundirse a través de la red de poros del carbón activado. Cada una de estas etapas puede contribuir a la resistencia global al transporte de masa y, por consiguiente, influir sobre la velocidad de captura observada experimentalmente. La Figura 3.19 presenta un esquema conceptual de los principales mecanismos involucrados durante la adsorción de  $\text{CO}_2$  en monolitos de carbón activado. El proceso puede describirse mediante tres etapas principales: (i) difusión externa desde el aire circundante hacia la superficie del canal, (ii) difusión interna a través de la estructura porosa del adsorbente y (iii) adsorción del  $\text{CO}_2$  sobre los sitios activos disponibles dentro de los microporos y mesoporos. Este esquema tiene fines ilustrativos y busca facilitar la

comprensión de los fenómenos de transporte asociados al desempeño de estructuras monolíticas adsorbentes.

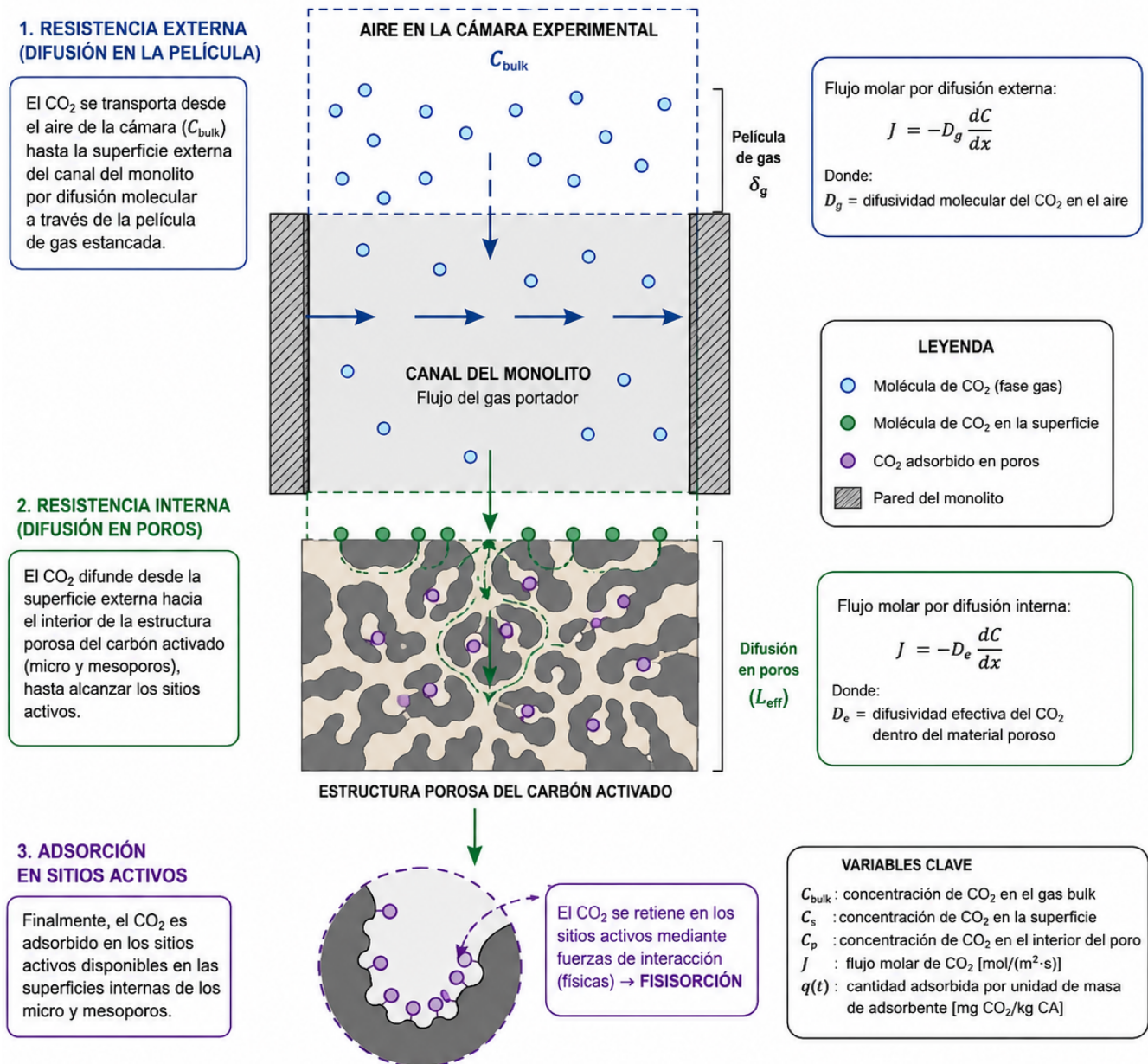


Figura 3.19: Esquema conceptual de los mecanismos de transferencia de masa involucrados en la adsorción de CO<sub>2</sub> en monolitos de carbón activado (elaboración propia basada en los mecanismos de transferencia de masa descritos por [58]).

# Capítulo 4

## Diseño Experimental

Para evaluar el desempeño adsorbente de pellets con geometría monolítica en condiciones de captura directa de  $\text{CO}_2$  desde el aire (DAC), se diseñó un experimento basado en la comparación sistemática de configuraciones geométricas variables.

### 4.1 Variables de Proceso

Para el diseño experimental del presente estudio, es necesario identificar claramente las variables que intervienen en el comportamiento del sistema de captura de  $\text{CO}_2$  mediante pellets en forma de monolitos de carbón activado. Estas variables se agrupan según su función dentro del experimento en tres categorías: independientes, dependientes y controladas.

Los parámetros de diseño de un pellet monolito son el tamaño de canal y el espesor de pared, las cuales dependen del diseño de este contactor, como se observa en la Figura 4.1. En este caso, estos pellets tienen una estructura cilíndrica, con un diámetro de alrededor de 7 cm y una altura de 5 cm, conteniendo canales de sección cuadrada definidos por el tamaño de celda cuadrada (tamaño de canal) y el espesor de pared. A partir de estas dimensiones geométricas se pueden determinar otras variables estructurales relevantes para evaluar su rendimiento en captura de  $\text{CO}_2$ . La fracción de vacío representa la proporción del volumen total del pellet que corresponde a los canales vacíos por donde circula el aire. La densidad de celda se refiere al número de canales por unidad de área transversal del monolito (normalmente expresado en celdas por pulgada cuadrada, cpsi). Por otro

lado, el área superficial disponible es el área interna de los canales expuesta al flujo de aire, que puede interactuar directamente con el adsorbente en las paredes del monolito. En la Tabla 4.1 se desglosan todas las variables experimentales contempladas en ese trabajo.

Tabla 4.1: Listado de variables experimentales

| Tipo de variable    | Variable                                  | Unidad                        |
|---------------------|-------------------------------------------|-------------------------------|
| <b>Diseño</b>       | Tamaño de celda cuadrada                  | mm                            |
|                     | Espesor de pared                          | mm                            |
| <b>Dependientes</b> | Fracción de vacío                         | -                             |
|                     | Densidad de celda                         | celdas/in <sup>2</sup> (cpsi) |
|                     | Área superficial disponible               | m <sup>2</sup> /g             |
|                     | Capacidad de adsorción de CO <sub>2</sub> | mg CO <sub>2</sub> /kg CA     |
|                     | Eficiencia de captura C/C <sub>0</sub>    | %                             |
|                     | Tiempo de saturación                      | min                           |
| <b>Controladas</b>  | Volumen de aire en cámara                 | cm <sup>3</sup>               |
|                     | Masa de carbón activado por corrida       | kg                            |
|                     | Proporción CA:CMC                         | -                             |
|                     | Condiciones de exposición                 | °C / % Humedad                |

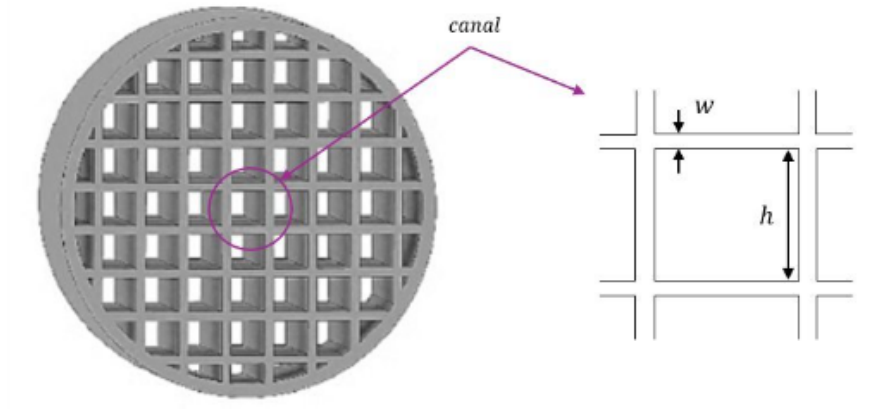


Figura 4.1: Variables dimensionales pellets monolitos.

La morfología de los pellets monolíticos puede describirse a partir de dos dimensiones fundamentales: el tamaño de canal ( $D$ ) y el espesor de pared ( $w$ ). A partir de estos parámetros básicos es posible derivar magnitudes morfológicas clave para el análisis del desempeño en captura de CO<sub>2</sub>, tales como la fracción de vacío ( $\varepsilon$ ), que representa el volumen accesible al gas dentro de la estructura; la densidad de celda (CD), que indica el número de canales por unidad de área y por lo tanto la compacidad geométrica del diseño; y la relación superficie-volumen ( $S/V$ ), que expresa la cantidad

de superficie activa disponible por unidad de volumen del pellet. De esta forma, el control de  $D$  y  $w$  permite ajustar simultáneamente la accesibilidad del flujo, la resistencia mecánica y la eficiencia de captura, integrando en un solo marco geométrico los factores principales que gobiernan el desempeño de los pellets monolíticos.

La porosidad aparente (*void fraction*) representa el porcentaje de volumen del pellet que no está ocupado por material sólido, y que potencialmente puede estar disponible para el acceso de gases durante la adsorción.

$$\varepsilon = 1 - \frac{\rho_{\text{aparente}}}{\rho_{\text{real}}} \quad (4.1)$$

Donde  $\varepsilon$  es la fracción de vacío (adimensional),  $\rho_{\text{aparente}}$  es la densidad aparente del pellet seco ( $\text{g}/\text{cm}^3$ ), y  $\rho_{\text{real}}$  es la densidad teórica de la mezcla CA:CMC.

Se incluyó el parámetro densidad de celda (CD) para los pellets monolíticos, calculado a partir de la dimensión geométrica de canal y espesor de pared como:

$$\text{CD} = \frac{1}{(D + w)^2} \quad (4.2)$$

Donde  $D$  corresponde al tamaño del canal (mm) y  $w$  al espesor de pared (mm). Esta expresión entrega el número de celdas por unidad de área ( $\text{celdas}/\text{mm}^2$ ), considerando que cada celda está formada por el canal más el espesor de pared circundante.

Otro parámetro geométrico relevante es la relación superficie a volumen ( $S/V$ ), que representa la cantidad de área superficial expuesta por unidad de volumen del pellet monolítico. Este valor se calculó a partir de la geometría del canal cuadrado como:

$$\frac{S}{V} = \frac{4D}{(D + w)^2} \quad (4.3)$$

Donde  $D$  corresponde al tamaño del canal (mm) y  $w$  al espesor de pared (mm).

El numerador  $4D$  proviene del perímetro del canal cuadrado (cuatro lados de longitud  $D$ ), mientras que el denominador  $(D + w)^2$  corresponde al área ocupada por cada celda, incluyendo el canal y el espesor de pared circundante.

De esta manera, la relación  $S/V$  permite evaluar qué tan eficiente es la geometría en términos de superficie activa disponible para la captura de  $\text{CO}_2$  respecto al volumen total ocupado.

## 4.2 Diseño Experimental

El diseño experimental contempló diversas corridas duplicadas bajo condiciones ambientales controladas, en las que se evalúan distintas configuraciones geométricas de monolitos, junto con un control en forma granular (polvo de carbón activado). Cada corrida se realiza en pares para asegurar reproducibilidad y consistencia estadística.

En este esquema, la variable principal corresponde a la morfología del adsorbente. Monolitos de distintos espesores y tamaños de canal y carbón activado en forma granular, utilizado como control. La Tabla 4.2 resume las condiciones de operación y configuraciones geométricas evaluadas.

La temperatura y la humedad relativa del ambiente se registran en cada corrida, pero no es posible controlarlas directamente, dado que corresponden a variables atmosféricas propias del entorno experimental. Su monitoreo permite, no obstante, evaluar su posible influencia en la capacidad de adsorción durante los ensayos.

Tabla 4.2: Diseño experimental por corrida

| N° | Diseño  | Forma    | Espesor<br>(mm) | Tamaño<br>canal (mm) | Temperatura<br>(°C) | Humedad<br>(%)   |
|----|---------|----------|-----------------|----------------------|---------------------|------------------|
| A1 | 1       | Monolito | 7               | 7                    | Temp <sub>1</sub>   | Hum <sub>1</sub> |
| A2 | 1       | Monolito | 7               | 7                    | Temp <sub>2</sub>   | Hum <sub>2</sub> |
| B1 | 2       | Monolito | 5               | 7                    | Temp <sub>3</sub>   | Hum <sub>3</sub> |
| B2 | 2       | Monolito | 5               | 7                    | Temp <sub>4</sub>   | Hum <sub>4</sub> |
| C1 | 3       | Monolito | 5               | 5                    | Temp <sub>5</sub>   | Hum <sub>5</sub> |
| C2 | 3       | Monolito | 5               | 5                    | Temp <sub>6</sub>   | Hum <sub>6</sub> |
| D1 | Control | Granular | —               | —                    | Temp <sub>7</sub>   | Hum <sub>7</sub> |

En todos los casos, la masa de carbón activado se mantuvo constante para garantizar comparabilidad

entre configuraciones. Para los monolitos se empleó una relación de 2:1 entre CA y carboximetilcelulosa (CMC), lo cual asegura buena cohesión estructural sin comprometer la porosidad del material. El control granular consistió en la misma cantidad de CA dosificada directamente.

Tabla 4.3: Distribución de proporción entre CMC y CA másico.

| Corrida | Configuración            | Masa CA (g) | Masa CMC (g) | Pellets |
|---------|--------------------------|-------------|--------------|---------|
| 1       | Canal 7 mm, espesor 7 mm | 600         | 300          | 1       |
| 2       | Canal 5 mm, espesor 7 mm | 600         | 300          | 1       |
| 3       | Canal 5 mm, espesor 5 mm | 600         | 300          | 1       |
| 4       | Granular (control)       | 100         | —            | —       |

Este diseño permite comparar directamente el efecto de la morfología (granular vs. monolito) y de las dimensiones geométricas internas (espesor de pared y tamaño de canal) sobre la capacidad de adsorción de  $\text{CO}_2$  bajo condiciones ambientales reales.

A continuación, se presentan los tres diseños de pellets monolíticos empleados en la primera etapa experimental (ver Figura 4.2). Los parámetros evaluados incluyeron volumen, densidad aparente, fracción de vacío, densidad de celda y la relación área superficial por volumen. Estos indicadores permiten comparar el grado de compactación de la estructura, el espacio disponible para el ingreso del aire y la superficie efectiva accesible para la adsorción de  $\text{CO}_2$ .



Figura 4.2: Diseños elaborados para el primer set experimental.

Tabla 4.4: Parámetros morfológicos de los pellets monolíticos evaluados.

| <b>Parámetro</b>                                         | <b>Diseño 1</b> | <b>Diseño 2</b> | <b>Diseño 3</b> |
|----------------------------------------------------------|-----------------|-----------------|-----------------|
| Canal, mm                                                | 7               | 5               | 5               |
| Espesor de pared, mm                                     | 7               | 7               | 5               |
| Celda total (D+w), mm                                    | 14              | 12              | 10              |
| Masa, g                                                  | 71              | 67              | 67              |
| Fracción de vacío                                        | 0,133           | 0.119           | 0.164           |
| Densidad de celda, celdas/cm <sup>2</sup>                | 5.10            | 6.94            | 10.00           |
| Densidad de celda, cpsi                                  | 329             | 448             | 645             |
| Área superficial/volumen, m <sup>2</sup> /m <sup>3</sup> | 142.9           | 138.9           | 200.0           |
| Área efectiva de contacto, m <sup>2</sup>                | 0.0330          | 0.0358          | 0.0438          |
| Número de canales                                        | 13              | 21              | 29              |

Los parámetros presentados en la Tabla 4.4 corresponden a valores teóricos obtenidos a partir del diseño geométrico de los pellets, calculados mediante relaciones analíticas, y representan el comportamiento esperado de cada configuración en términos de área disponible, densidad estructural y fracción de vacío.

En este contexto, el diseño 3 (canal de 5 mm y espesor de 5 mm) fue concebido para maximizar la densidad de celda y la fracción de vacío, lo que se refleja en los valores calculados de 10 celdas/cm<sup>2</sup> (645 cpsi) y 0.164, respectivamente, junto con una relación S/V de 200 m<sup>2</sup>/m<sup>3</sup>. Esto sugiere un mayor potencial de área disponible para la adsorción. Por su parte, el diseño 2 (canal de 5 mm y espesor de 7 mm) responde a una configuración más compacta, donde el aumento del espesor de pared reduce la fracción de vacío (0.119) y la densidad de celda (6.94 celdas/cm<sup>2</sup>), limitando el espacio disponible para el flujo, aunque manteniendo una relación S/V intermedia de 138.9 m<sup>2</sup>/m<sup>3</sup>. Finalmente, el diseño 1 (canal de 7 mm y espesor de 7 mm) fue planteado como una geometría menos densa, lo que se traduce en la menor densidad de celda (5.10 celdas/cm<sup>2</sup>) y una fracción de vacío intermedia (0.133), con una relación S/V de 142.9 m<sup>2</sup>/m<sup>3</sup>.

# Capítulo 5

## Materiales y Métodos

La presente investigación evalúa el desempeño de pellets monolíticos de carbón activado con distintas geometrías para la captura de  $\text{CO}_2$  en condiciones ambientales controladas. Para ello, se deben fabricar los pellets, moldearlos, secarlos y disponerlos en los dispositivos de captura. A continuación, en este capítulo se detallan los materiales, métodos o procedimientos utilizados en la realización del trabajo.

### 5.1 Equipos y Materiales

Para la fabricación de los pellets monolíticos y el desarrollo de los ensayos experimentales de captura de  $\text{CO}_2$ , se utilizaron distintos equipos, materiales y sistemas de adquisición de datos. Estos elementos permitieron llevar a cabo las etapas de preparación del carbón activado, elaboración de los pellets, operación del sistema DAC y monitoreo de las variables experimentales. El material adsorbente utilizado correspondió a carbón activado comercial derivado de cáscara de coco, seleccionado debido a su alta microporosidad y elevada área superficial específica. Previo a la fabricación de los pellets monolíticos, el carbón activado fue sometido a reducción de tamaño utilizando un molino de impacto de rotor SR 300 RETSCH y posteriormente tamizado mediante una malla de 0.5 mm para homogenizar la distribución granulométrica del material.

La preparación de las mezclas para la elaboración de los pellets se realizó utilizando agua destilada tipo III, beakers de vidrio borosilicatado de 2–3 L, agitadores mecánicos o varillas

manuales y una balanza digital con precisión de 0.01 g para el control de las proporciones de masa utilizadas. El monitoreo de temperatura durante distintas etapas experimentales se efectuó mediante un termómetro con resolución de  $\pm 1$  °C. Para garantizar uniformidad geométrica y reproducibilidad experimental, los pellets monolíticos fueron fabricados utilizando moldes diseñados mediante el software de modelado 3D *Tinkercad* y posteriormente impresos en una impresora 3D de deposición de filamento fundido (FDM) utilizando ácido poliláctico (PLA) como material de impresión. El uso de fabricación aditiva permitió controlar de manera precisa la geometría interna de los canales, el espesor de pared y las dimensiones globales de cada pellet, facilitando además la repetibilidad entre distintos ensayos experimentales.

Durante el diseño geométrico se decidió no incorporar canales en las zonas cercanas al perímetro externo del pellet. Esta decisión tuvo como objetivo preservar la resistencia mecánica de la estructura y evitar fracturas o deformaciones durante las etapas de desmoldeo, secado y manipulación experimental. Además, mantener una pared externa continua permitió mejorar la estabilidad dimensional del monolito y reducir la probabilidad de colapso estructural en los bordes, especialmente en configuraciones con alta densidad de canales.



Figura 5.1: Moldes impresos en 3D utilizados para la fabricación de pellets monolíticos con distintas configuraciones geométricas (desde arriba hacia abajo, diseño 1, 2 y 3).

La Tabla 5.1 resume los principales equipos y materiales utilizados durante el desarrollo experimental.

Tabla 5.1: Principales equipos y materiales utilizados en el desarrollo experimental

| <b>Equipo o material</b>           | <b>Descripción o función</b>                                              |
|------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------|
| Carbón activado de cáscara de coco | Material adsorbente utilizado en la fabricación de pellets y ensayos DAC. |
| Molino de impacto SR 300 RETSCH    | Reducción y homogenización granulométrica del carbón activado.            |
| Tamiz de 0.5 mm                    | Control de tamaño de partícula del carbón activado.                       |
| Agua destilada tipo III            | Preparación de mezclas para elaboración de pellets.                       |
| Beakers de vidrio borosilicatado   | Preparación y mezcla del material adsorbente.                             |
| Balanza digital                    | Medición de masa con precisión de 0.01 g.                                 |
| Agitador mecánico o varilla manual | Homogenización de mezclas.                                                |
| Termómetro                         | Monitoreo de temperatura experimental.                                    |
| Moldes impresos en 3D (PLA)        | Fabricación de pellets monolíticos con distintas geometrías.              |
| Cámara de adsorción de acrílico    | Volumen experimental para ensayos de captura de CO <sub>2</sub> .         |
| Bomba de vacío                     | Generación de vacío durante desorción y regeneración.                     |
| Válvula reguladora unidireccional  | Control de flujo y presión del sistema.                                   |
| Sensor Sensirion SCD30             | Medición de CO <sub>2</sub> , temperatura y humedad relativa.             |
| Sistema Arduino                    | Adquisición y almacenamiento de datos experimentales.                     |

## 5.2 Montaje Experimental

El diseño conceptual del dispositivo se fundamentó en la literatura sobre sistemas de Captura Directa de Aire (S-DAC) y, en particular, en procesos basados en Adsorción por Vacío (VSA) [23]. Esta revisión permitió establecer como criterios principales de diseño la necesidad de un equipo compacto, de bajo consumo energético, fácilmente instrumentable y capaz de reproducir, a escala reducida.

El sistema se organiza en torno al flujo de aire ambiental que ingresa al interior de la cámara de adsorción. Durante esta etapa, el CO<sub>2</sub> presente en la corriente de aire es retenido en el material adsorbente. Una vez alcanzada la saturación del medio por adsorción, la misma bomba permite reducir la presión interna de la cámara, activando la etapa de desorción por vacío, en la cual el CO<sub>2</sub> capturado es liberado del lecho. La Figura 5.2 presenta el esquema general del diseño planteado para el proceso, donde se observa la disposición de la cámara, las conexiones al sistema de vacío y las rutas de flujo previstas para adsorción y desorción.

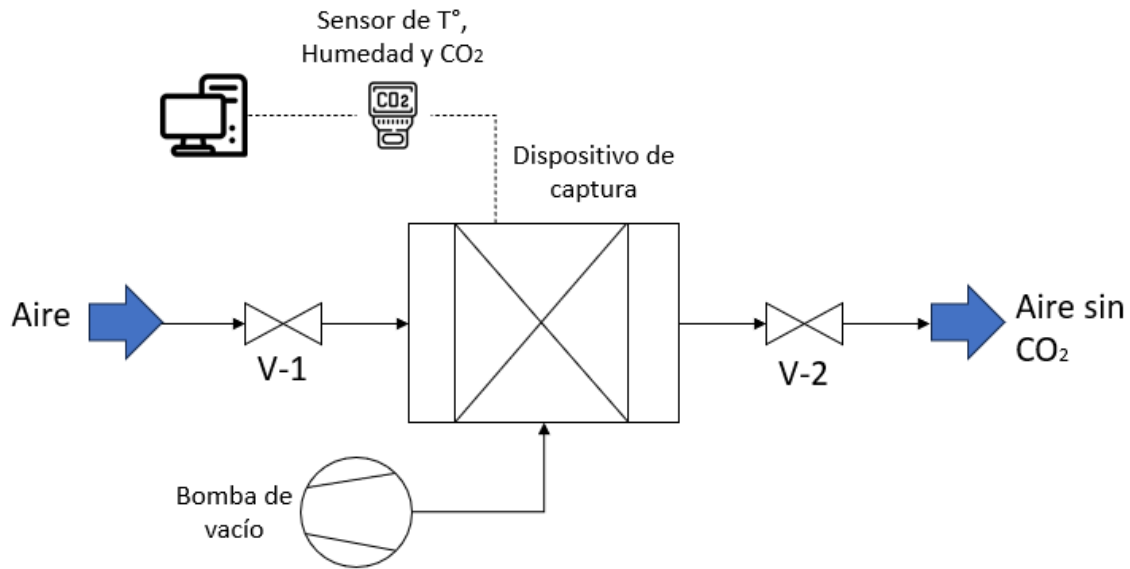


Figura 5.2: Diagrama esquemático del dispositivo DAC.

El término curva de ruptura se utiliza para describir la evolución temporal de la concentración de CO<sub>2</sub> medida dentro del sistema experimental durante el proceso de adsorción. En sistemas continuos convencionales de lecho fijo, las curvas de ruptura presentan típicamente una forma sigmoideal (tipo S), debido a que el frente de adsorción avanza progresivamente a través del lecho hasta alcanzar la salida del sistema. Inicialmente, el adsorbente captura prácticamente todo el CO<sub>2</sub>, manteniendo concentraciones cercanas a cero en la salida, y posteriormente la concentración aumenta gradualmente hasta aproximarse a la concentración de alimentación conforme el lecho se satura.

Sin embargo, en este trabajo el sistema opera en modo batch y sin flujo continuo atravesando completamente un lecho empacado. El CO<sub>2</sub> presente en el volumen de aire contenido dentro de la cámara comienza a adsorberse inmediatamente desde el inicio del ensayo, por lo que la concentración medida disminuye directamente con el tiempo en lugar de exhibir una curva sigmoideal convencional de ruptura. En consecuencia, las curvas obtenidas representan la cinética global de remoción de CO<sub>2</sub> dentro de un sistema cerrado, más que el avance espacial de un frente de adsorción típico de sistemas semicontinuos o continuos.

El montaje experimental del dispositivo se llevó a cabo en el laboratorio de Modelación Computacional Avanzada. El dispositivo de medición considera el uso de una cámara hermética construida con acrílico transparente de 4 mm de espesor, un material ligero y resistente que permite observar el interior del sistema durante su operación. La caja tiene dimensiones de 30 cm × 30 cm × 30 cm,

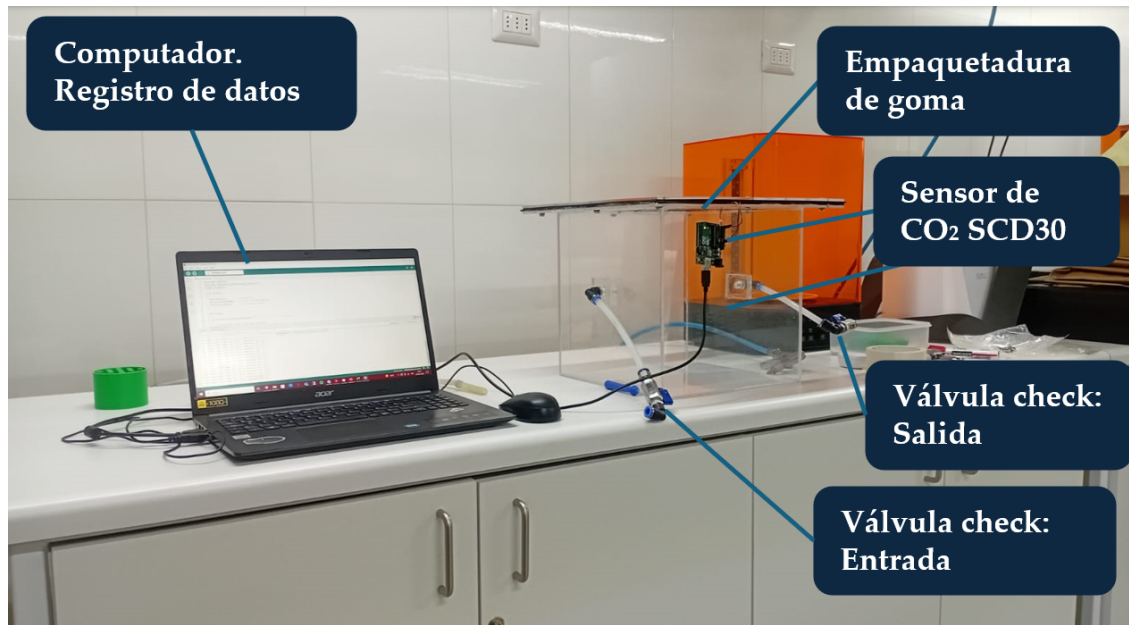


Figura 5.3: Montaje experimental para dispositivo escala domiciliaria

con un volumen total de  $27.000 \text{ cm}^3$ , y en su interior se coloca el lecho de carbón activado. Los componentes principales incluyen una bomba de vacío, esencial para el proceso de desorción por vacío (Vacuum Swing Adsorption), que reduce la presión durante la fase de desorción para liberar el  $\text{CO}_2$  capturado; sensores de  $\text{CO}_2$ , temperatura, humedad, que monitorean las condiciones internas; y dos válvulas check para controlar el ingreso y salida de aire.

### 5.2.1 Operación del dispositivo

El proceso de adsorción-desorción funciona en ciclos batch y consta de dos fases principales: adsorción y desorción (ver Figura 5.4).

Inicialmente, el sistema se encuentra en estado de reposo a presión ambiente. Durante la fase de adsorción, se abre la válvula de entrada para introducir una cantidad fija de aire ambiente en la caja, mientras que la bomba de vacío permanece apagada. Luego, se cierran las válvulas de entrada y salida para estancar el aire en el interior, y se registran las condiciones iniciales mediante sensores que miden tanto la presión como la concentración de  $\text{CO}_2$ . El aire estancado fluye a través del lecho de carbón activado, donde el  $\text{CO}_2$  es adsorbido, y este proceso es monitoreado por el sensor de  $\text{CO}_2$ , que permite observar la disminución de su concentración. La fase de adsorción finaliza cuando se alcanza un nivel mínimo de  $\text{CO}_2$ , lo cual indica que el carbón activado ha llegado a su

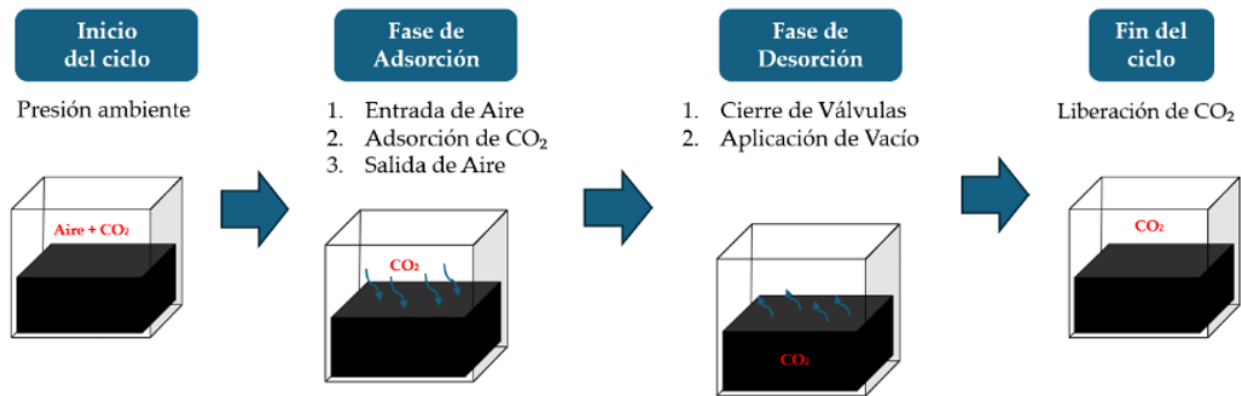


Figura 5.4: Proceso de captura en funcionamiento VSA

capacidad de adsorción. A continuación, se inicia la fase de desorción mediante la activación de la bomba de vacío, que está conectada a la entrada de aire. En este punto, la válvula de entrada se cierra para evitar la entrada de aire externo, y la válvula de salida se abre para permitir que el  $\text{CO}_2$  previamente adsorbido sea liberado debido a la disminución de presión. La concentración de  $\text{CO}_2$  liberado es también registrada por el sensor correspondiente. Finalmente, se restablece la presión interna a condiciones atmosféricas, dejando el sistema preparado para iniciar un nuevo ciclo.

### 5.2.2 Sensor de $\text{CO}_2$

El monitoreo continuo de concentración de  $\text{CO}_2$ , temperatura y humedad relativa se efectuó mediante un sensor Sensirion SCD30, con rango de medición de 400–10 000 ppm de  $\text{CO}_2$  y precisión de  $\pm(30 \text{ ppm} + 3\%)$ . El sistema experimental incorporó además una plataforma Arduino para la adquisición, lectura y almacenamiento de los datos experimentales registrados durante cada corrida.

El sensor incorpora seis pines, aunque para la comunicación mediante protocolo I2C únicamente se requieren cuatro de ellos. En la Tabla 5.2 se presenta el detalle funcional de cada pin.

Tabla 5.2: Pines del sensor SCD30 y su función.

| Pin | Función                  | Conexión recomendada                    |
|-----|--------------------------|-----------------------------------------|
| VDD | Alimentación (3.3–5.5 V) | Conexión a 3.3 V o 5 V                  |
| GND | Tierra eléctrica         | Conexión a GND                          |
| SCL | Línea de reloj I2C       | Conexión a pin SCL del microcontrolador |
| SDA | Línea de datos I2C       | Conexión a pin SDA del microcontrolador |

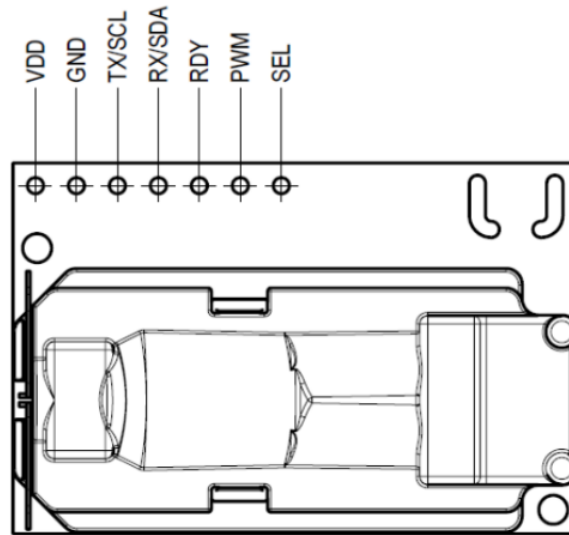


Figura 5.5: Vista esquemática del sensor SCD30.

Con el fin de garantizar mediciones precisas, se realizó una calibración por comparación utilizando un medidor de referencia PCE-7755, previamente ajustado a 400 ppm en aire exterior. Ambos sensores, el incorporado al prototipo DAC y el PCE-7755, fueron posicionados en paralelo bajo las mismas condiciones ambientales y de flujo para registrar simultáneamente las concentraciones de  $\text{CO}_2$ . El sensor integrado fue ajustado hasta obtener lecturas equivalentes al equipo de referencia dentro del margen de precisión esperado. Posteriormente, se realizaron las corridas experimentales utilizando el sensor ya calibrado.



Figura 5.6: Sensor PCE-7755 utilizado para la calibración del sensor SCD30

## 5.3 Elaboración de Pellets Monolíticos

### 5.3.1 Preparación del carbón activado

El carbón activado (CA) granulado  $8 \times 30$  mesh se muele mediante un molino de impacto de rotor SR 300 RETSH durante 10 min a 4000 rpm, se tamiza utilizando una malla de 0.5 mm dentro del equipo, lo que permite obtener una fracción de partículas con tamaño final inferior a  $500\ \mu\text{m}$ . La distribución estimada de tamaño de partícula se encuentra en una mediana de  $200\text{--}350\ \mu\text{m}$ , con un rango entre  $100$  y  $500\ \mu\text{m}$ . A partir de 1 kg de CA granulado, se obtiene entre  $750\text{--}850\ \text{g}$  de polvo fino útil, mientras que el remanente ( $150\text{--}250\ \text{g}$ ) corresponde a material grueso, el cual se almacena para futuros usos o tratamientos adicionales. En la Figura 5.7 se observa el polvo después del proceso de molienda.



Figura 5.7: Polvo molido con motor de impacto de rotor SR 300 RETSH, el polvo presenta un tamaño de partícula menor a  $500\ \mu\text{m}$

Durante la molienda se registró una pérdida significativa de masa, atribuida principalmente a la alta dispersión del polvo fino en suspensión durante el proceso de trituración y manipulación del material como se ve en la Figura 5.7.

### 5.3.2 Preparación del medio líquido y disolución del aglutinante

Para la preparación de la solución aglutinante, se utilizaron 1,5 L de agua destilada tipo III, los cuales fueron calentados hasta alcanzar una temperatura aproximada de 60 °C utilizando un hervidor como se puede observar en la Figura 5.8. El agua caliente fue transferida a un recipiente plástico de 3 L de capacidad, que se empleó como cámara de mezclado. Posteriormente, se incorporaron 300 g de carboximetilcelulosa (CMC) de forma manual, añadiendo el polvo en forma de “lluvia fina” sobre la superficie del agua caliente. Durante todo el proceso, se mantuvo una mezcla constante utilizando una espátula de acero inoxidable, con movimientos circulares suaves para favorecer la dispersión del CMC y evitar la formación de grumos. La agitación se prolongó durante aproximadamente 20 minutos, hasta obtener una solución de textura viscosa, homogénea y libre de grumos visibles.



Figura 5.8: Implementos de laboratorio.

### 5.3.3 Incorporación del carbón activado

Una vez obtenida la solución viscosa de CMC, se procedió a incorporar 670 g de carbón activado en polvo previamente tamizado. La adición del carbón se realizó de forma gradual, en porciones de aproximadamente 100 g, con el objetivo de facilitar su dispersión uniforme dentro del medio aglutinante y evitar la formación de aglomerados secos. Durante todo el proceso, la mezcla se

trabajó manualmente utilizando una espátula de acero inoxidable, manteniendo una agitación constante y vigorosa durante un período de 30 a 35 minutos.



Figura 5.9: Masado de manera manual durante 30-35 min hasta lograr una consistencia homogénea de la pasta.

Este procedimiento permitió obtener una pasta densa, homogénea y de color oscuro, sin presencia de agua libre. La mezcla adquirió una consistencia adecuada para el moldeo, con suficiente cohesión y viscosidad como para ser manipulada en moldes sin deformarse. Cabe destacar que toda la preparación fue realizada sin el uso de agitadores mecánicos, como prueba preliminar para evaluar la viabilidad de fabricar pellets moldeables mediante un proceso manual de bajo costo (ver Figura 5.9). La pasta debe mantener su forma sobre una superficie horizontal, sin agua libre, y fluir bajo presión desde una espátula.

#### 5.3.4 Secado

Una vez moldeados, los pellets fueron sometidos a un proceso de secado en horno convectivo durante un periodo continuo de 48 horas a una temperatura controlada de 25 °C. El secado se realizó en un ambiente seco, sin exposición a humedad ambiental, con el fin de evitar agrietamientos o deformaciones durante la pérdida de agua. Esta etapa es crucial para estabilizar mecánicamente los pellets antes de cualquier tratamiento térmico posterior. Como medida complementaria, una vez completado el secado, los monolitos fueron transferidos a una desecadora con sílica gel, donde

se almacenaron para eliminar humedad residual y evitar su reabsorción. Alternativamente, en otros ensayos es posible acelerar el proceso de secado utilizando una estufa a 40–50 °C, siempre que se controle cuidadosamente la ventilación y se evite un secado demasiado rápido que pueda comprometer la integridad estructural de los pellets (ver Figura 5.10).

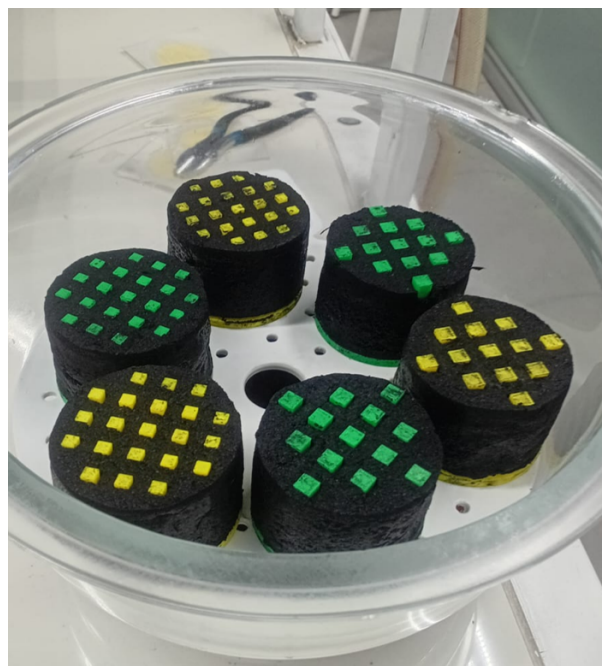


Figura 5.10: Pellets dispuestos en desecadora con sílica gel para eliminar humedad.

### 5.3.5 Tratamiento térmico

El tratamiento térmico tiene como objetivo eliminar completamente el aglutinante (CMC) presente en la estructura y de esta manera, mejorar el área superficial específica del carbón activado. Este proceso se llevó a cabo en un horno convectivo operando en condiciones de aire, programado a una temperatura constante de 150 °C durante un período de 2 horas. A diferencia de los tratamientos realizados en hornos tubulares bajo atmósferas inertes, el uso de un horno convectivo implica que el calentamiento se desarrolla mediante circulación forzada de aire, lo cual favorece una descomposición térmica homogénea del aglutinante en toda la muestra. Posteriormente, se permitió el enfriamiento natural de las piezas dentro del horno hasta temperatura ambiente, sin necesidad de atmósfera protectora como se ve en la Figura 5.11.

Como resultado de este tratamiento, se espera la eliminación parcial a casi total del aglutinante, dependiendo de la proporción inicial de CMC en la mezcla. Este proceso conlleva típicamente una

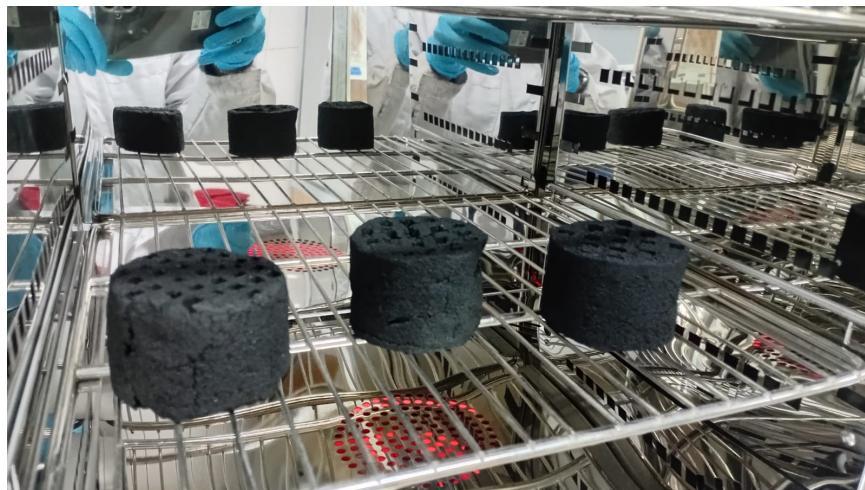


Figura 5.11: Pellets con tratamiento térmico en horno convectivo

pérdida de masa del orden del 15–25%, atribuible a la degradación térmica del aglutinante y a la liberación de compuestos volátiles. Adicionalmente, se anticipa un incremento en la accesibilidad de los poros y en la superficie efectiva del material carbonáceo, propiedades que podrán ser posteriormente evaluadas mediante análisis de isothermas de adsorción de  $\text{CO}_2$ .

## 5.4 Caracterización Física del Carbón Activado

El carbón activado utilizado en este trabajo corresponde a un carbón granular de cáscara de coco, suministrado por la empresa *Agua Pura Chile SpA* (fabricado por Zhulin Activated Carbon Group, Tailandia) (ver Figura 5.12). Este material es activado con vapor, sin adición de agentes químicos, lo que garantiza su inocuidad en aplicaciones de adsorción. Se caracteriza por una elevada dureza mecánica y una estructura porosa dominada por micro a meso-poros (5–50 nm), adecuados para la captura de moléculas pequeñas. Estas propiedades lo convierten en un adsorbente versátil, empleado en aplicaciones de purificación de agua, aire y gases, así como en procesos metalúrgicos de recuperación de metales preciosos.

Las principales características técnicas entregadas por el proveedor se resumen en la Tabla 5.3.



Figura 5.12: Carbón activado de cáscara de coco fabricado por Zhulin Activated Carbon Group.

Tabla 5.3: Propiedades físicas del carbón activado en polvo (ficha técnica del proveedor).

| <b>Propiedad</b>                     | <b>Valor / Rango</b>                   |
|--------------------------------------|----------------------------------------|
| Origen                               | Cáscara de coco (Tailandia)            |
| Método de activación                 | Vapor (sin agentes químicos)           |
| Aspecto                              | Granular, color negro                  |
| Tamaño de partícula                  | Malla 8 x 30 ASTM (2,38–0,60 mm; >95%) |
| Índice de yodo (ASTM D4607)          | > 1000 mg/g                            |
| Humedad (ASTM D2867-04)              | < 5%                                   |
| Densidad aparente (ASTM D2854-04)    | 0,53–0,56 g/mL                         |
| Contenido de cenizas (ASTM D2866-04) | < 3%                                   |
| Formato de entrega                   | Sacos de 25 kg                         |
| Vida útil                            | 60 meses (5–30°C, en envase sellado)   |

Este carbón activado presenta baja humedad y reducido contenido de cenizas, características que favorecen su estabilidad en procesos de adsorción. Además, la granulometría 8 x 30 asegura una adecuada retención en filtros de profundidad, reduciendo las pérdidas de material fino y mejorando la humectación durante la puesta en operación. Su ordenamiento granular homogéneo también contribuye a evitar canalizaciones en flujo descendente.

## 5.5 Caracterización Textural del Carbón Activado

La caracterización textural mediante adsorción física de nitrógeno permite evaluar la estructura porosa del carbón activado, particularmente parámetros como área superficial específica, volumen de poros y distribución de tamaños de poro, propiedades directamente relacionadas con la capacidad de adsorción de  $\text{CO}_2$ . El método Brunauer–Emmett–Teller (BET) se basa en la adsorción multicapa de moléculas de  $\text{N}_2$  sobre la superficie del sólido a 77 K. A partir de la isoterma de adsorción obtenida experimentalmente, es posible estimar la cantidad de gas necesaria para formar una monocapa sobre toda la superficie accesible del material [58]. La ecuación BET se expresa como:

$$\frac{1}{V \left( \frac{P_0}{P} - 1 \right)} = \frac{C - 1}{V_m C} \left( \frac{P}{P_0} \right) + \frac{1}{V_m C} \quad (5.1)$$

Donde  $V$  corresponde al volumen adsorbido de  $\text{N}_2$ ,  $V_m$  es el volumen de monocapa adsorbida,  $P/P_0$  es la presión relativa y  $C$  es la constante BET asociada a la energía de adsorción superficial.

A partir del valor de  $V_m$ , se calcula el área superficial específica BET, la cual representa el área total accesible para la adsorción de moléculas de  $\text{N}_2$ , incluyendo superficies externas, mesoporos y microporos accesibles. Por esta razón, el área BET corresponde a un parámetro global de superficie.

Sin embargo, en materiales microporosos como el carbón activado, no toda el área BET posee la misma relevancia para la captura de  $\text{CO}_2$ . En particular, los microporos (diámetro  $< 2$  nm) presentan una mayor importancia debido a que generan mayores interacciones potenciales entre las paredes del poro y las moléculas adsorbidas, favoreciendo la adsorción física de  $\text{CO}_2$  a bajas presiones parciales. Por ello, además del área BET total, resulta relevante diferenciar específicamente la contribución del área microporosa [78].

En procesos DAC, se ha reportado que microporos ultrafinos inferiores a aproximadamente 0.8 nm favorecen significativamente la adsorción de  $\text{CO}_2$ , debido al aumento del potencial de adsorción dentro del poro y a una mayor superposición de fuerzas intermoleculares [78]. En contraste, mesoporos y macroporos contribuyen principalmente al transporte de masa y accesibilidad difusiva, facilitando el desplazamiento del  $\text{CO}_2$  hacia las regiones microporosas activas [23]. Por esta razón, en este trabajo se evaluaron tanto el área BET total como la contribución de microporosidad, permitiendo relacionar la textura porosa del carbón activado con el desempeño experimental observado en captura DAC.

Se evaluaron cinco tipos de muestras de carbón activado de cáscara de coco de origen comercial, las cuales difieren en su morfología, geometría macroscópica y condición física. Las muestras incluyeron carbón activado en polvo, pellets monolíticos con distintas configuraciones geométricas y una muestra de pellet triturado. Cabe destacar que los pellets monolíticos utilizados en los ensayos BET correspondieron a fragmentos de menor tamaño obtenidos a partir del pellet original, lo que facilitó su manipulación experimental y permitió asegurar una adecuada transferencia de masa durante los procesos de desgasificado y adsorción. Esta consideración no aplica a la muestra en polvo ni a la muestra correspondiente al Diseño 4 molido.

La masa utilizada para cada ensayo BET se seleccionó en función de la densidad aparente, la geometría y la facilidad de desgasificado de cada muestra. En el caso del carbón activado en polvo se empleó aproximadamente 1 g de material, mientras que para los fragmentos de pellets monolíticos se utilizaron masas comprendidas entre 0.3 y 0.7 g. La descripción general de las muestras analizadas y las masas utilizadas se presentan en la Tabla 5.4.

Tabla 5.4: Descripción de las muestras utilizadas en los análisis BET y masas empleadas en cada ensayo

| ID | Morfología                 | Espesor de pared [mm] | Tamaño de canal [mm] | Masa [g] |
|----|----------------------------|-----------------------|----------------------|----------|
| M1 | Carbón activado en polvo   | —                     | —                    | 1,02     |
| M2 | Pellet monolítico Diseño 4 | 4                     | 4                    | 0,635    |
| M3 | Pellet monolítico Diseño 5 | 3                     | 5                    | 0,3429   |
| M4 | Pellet monolítico Diseño 6 | 3                     | 3                    | 0,618    |
| M5 | Diseño 4 molido            | —                     | —                    | 0,677    |

Con el objetivo de eliminar la humedad superficial adsorbida durante el almacenamiento y la manipulación previa al análisis, todas las muestras fueron sometidas a un secado preliminar antes de su caracterización mediante adsorción de  $N_2$  (BET). Este procedimiento fue considerado únicamente como un pretratamiento y no sustituyó el proceso de desgasificado final previo al análisis.

El secado inicial se llevó a cabo en un horno convectivo bajo condiciones controladas, utilizando crisoles o cápsulas de porcelana o vidrio, evitando el empleo de recipientes plásticos. Las condiciones operacionales del pretratamiento se resumen en la Tabla 5.5.

Una vez finalizado el secado, las muestras fueron transferidas inmediatamente a viales de vidrio herméticos como se observa en la Figura 5.13 y almacenadas en un desecador hasta su envío al laboratorio de análisis, con el fin de minimizar la readsorción de humedad ambiental.

Tabla 5.5: Condiciones del secado preliminar de las muestras previo al análisis BET

| Parámetro        | Condición                                      |
|------------------|------------------------------------------------|
| Material tratado | Carbón activado en polvo y pellets monolíticos |
| Recipiente       | Crisoles o cápsulas de porcelana o vidrio      |
| Equipo           | Horno convectivo                               |
| Temperatura      | 115 °C                                         |
| Tiempo de secado | 12 h                                           |
| Propósito        | Eliminación de humedad superficial adsorbida   |



Figura 5.13: Muestras de cada diseño puestas en viales de vidrio

El desgasificado final de las muestras se efectuó bajo condiciones de vacío elevado, con el objetivo de remover especies adsorbidas de mayor afinidad, tales como agua, dióxido de carbono, nitrógeno residual y compuestos orgánicos volátiles.

Para evitar modificaciones estructurales del material carbonoso y posibles pérdidas de área superficial, se aplicó un protocolo de desgasificado suave, operando a una temperatura de 180 °C durante un período comprendido entre 4 y 6 h. Esta temperatura fue seleccionada considerando la estabilidad térmica del carbón activado de origen biomásico.

Las isothermas completas de adsorción–desorción de N<sub>2</sub> se obtuvieron a 77 K, utilizando nitrógeno líquido como refrigerante. El rango de presión relativa ( $P/P_0$ ) explorado durante los ensayos se extendió desde 0,01 hasta 0,99, asegurando la cobertura de las regiones asociadas a microporosidad y mesoporosidad del material.

Durante el análisis, se introdujeron incrementos controlados de nitrógeno, permitiendo alcanzar el equilibrio de adsorción en cada punto de presión antes del registro de los datos experimentales. Posteriormente, la presión se redujo de forma controlada para obtener la rama de desorción de la isoterma.

A partir de las isotermas de adsorción obtenidas, se determinaron los siguientes parámetros texturales:

- **Área superficial específica BET ( $\text{m}^2\cdot\text{g}^{-1}$ ):** Calculada a partir de la ecuación de Brunauer Emmett Teller aplicada a la rama de adsorción, utilizando un rango de presión relativa típicamente comprendido entre 0,05 y 0,30. El ajuste lineal permitió obtener la capacidad de monocapa ( $V_m$ ) y la constante BET ( $C$ ).
- **Volumen de microporos ( $d < 2 \text{ nm}$ ):** Determinado a partir del análisis de microporosidad del material.
- **Distribución de tamaño de poro:** Obtenida mediante el método de Barrett–Joyner–Halenda (BJH), aplicado principalmente a la rama de desorción de la isoterma.
- **Análisis de microporosidad:** Realizado mediante el método *t-plot*, permitiendo diferenciar la contribución de la superficie microporosa y la superficie externa asociada a mesoporos y macroporos.
- **Contribución de mesoporos:** Evaluada a partir del volumen de poros en el rango de 2–50 nm calculado mediante el método BJH.

La isoterma completa de adsorción–desorción de  $\text{N}_2$  a 77 K constituyó la base experimental para la determinación y comparación de todos los parámetros texturales entre el carbón activado en polvo y los pellets monolíticos analizados.

## 5.6 pH Carga 0

La determinación del pH del punto de carga cero ( $\text{pH}_{\text{PZC}}$ ) del carbón activado de cáscara de coco se realizó mediante el método de desplazamiento de pH, siguiendo los lineamientos descritos por

Lowden (2022) y de acuerdo con los criterios establecidos en la norma ASTM D6851/D6851M para la caracterización de materiales carbonosos.

Inicialmente, se añadieron 50 mL de agua destilada tipo II en once matraces Erlenmeyer de 100 mL. El pH inicial de cada sistema se ajustó en un rango comprendido entre pH 2 y pH 12 mediante la adición controlada, gota a gota, de soluciones acuosas de hidróxido de sodio (NaOH) o ácido clorhídrico (HCl) de concentración adecuada. El ajuste de pH se realizó bajo agitación manual suave y con monitoreo continuo utilizando un pH-metro previamente calibrado (modelo Orion Star A329).

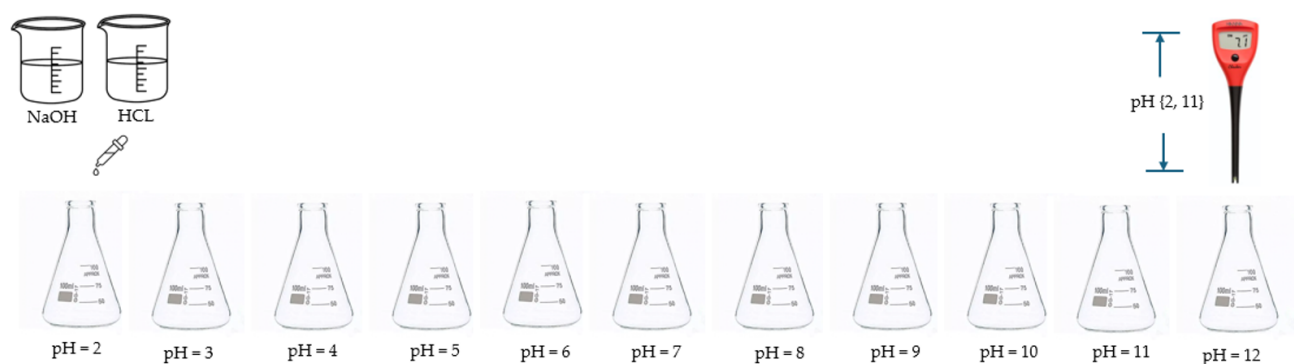


Figura 5.14: Matraces con soluciones acuosas ajustadas a distintos valores de pH inicial.

Una vez alcanzado el pH inicial deseado, se adicionaron 0,25 g de carbón activado de cáscara de coco previamente seco y pesado empleando una balanza analítica. Posteriormente, los matraces se colocaron en un agitador orbital (modelo FS-70B, marca Faithful, China), operando a una velocidad de 120 rpm durante 24 h, a temperatura ambiente, con el fin de asegurar el equilibrio sólido-líquido entre la superficie del adsorbente y la fase acuosa.

Finalizado el tiempo de contacto de 24 h, las suspensiones se retiraron del agitador orbital y se procedió a la separación sólido-líquido de cada sistema. Para ello, cada mezcla se filtró individualmente utilizando un sistema de filtración al vacío, compuesto por un embudo Büchner, un matraz Kitasato y una bomba de vacío, empleando papel filtro de nitrocelulosa. La solución acuosa obtenida tras la filtración se utilizó para la medición del pH final, el cual se determinó directamente sobre el filtrado, con el objetivo de evitar interferencias asociadas a la presencia de partículas sólidas en suspensión. Una vez realizada la medición del pH final, las soluciones acuosas filtradas se reunieron en un recipiente de almacenamiento común, para su disposición posterior conforme a los protocolos del laboratorio.

El sólido retenido en el papel filtro, correspondiente al carbón activado, se depositó según las indicaciones del laboratorio. Entre cada filtración, el sistema de filtrado se lavó cuidadosamente con agua destilada tipo II y se limpió con papel absorbente, con el fin de evitar contaminación cruzada entre muestras consecutivas.

El valor de  $\text{pH}_{\text{PZC}}$  se determinó gráficamente a partir de la representación del pH final en función del pH inicial, identificando el punto en el cual no se observa variación del pH ( $\Delta\text{pH} = 0$ ), condición que indica que la superficie del adsorbente presenta carga neta nula.

Para el ajuste del pH inicial de las soluciones acuosas, se prepararon soluciones de NaOH con concentraciones de 0.1, 1, 3, 5 y 10 M. La masa de NaOH requerida se calculó mediante la ecuación:

$$m_{\text{NaOH}} = C_{\text{NaOH}} \cdot V \cdot PM_{\text{NaOH}} \quad (5.2)$$

donde  $m_{\text{NaOH}}$  es la masa de hidróxido de sodio (g),  $C_{\text{NaOH}}$  la concentración deseada (M),  $V$  el volumen total de la solución (L) y  $PM_{\text{NaOH}}$  el peso molecular del NaOH (g/mol).

En una probeta de 100 mL se midieron 100 mL de agua destilada previamente calentada a 60°C y se transfirieron a un vaso precipitado de 500 mL. Bajo campana de extracción, se adicionó lentamente el NaOH sólido, agitando con una varilla de vidrio hasta su completa disolución. Luego se completó el volumen final a 250 mL con agua destilada hervida. Finalmente, la solución se trasvasijó a un frasco de vidrio de 250 mL rotulado.

Tabla 5.6: Masa de NaOH requerida para diferentes concentraciones.

| Concentración (M) | Masa de NaOH (g) |
|-------------------|------------------|
| 0,1               | 1,01             |
| 1                 | 10,10            |
| 3                 | 30,30            |
| 5                 | 50,50            |
| 10                | 101,00           |

Se prepararon soluciones de HCl de 0.1, 1, 3, 5 y 10 M a partir de ácido clorhídrico concentrado al 37 % v/v. Se midió el volumen correspondiente de agua destilada tipo II y se transfirió a un matraz aforado de 250 mL. Posteriormente, se añadió el volumen calculado de HCl concentrado y se agitó suavemente hasta homogeneizar.

El volumen de HCl concentrado requerido se calculó mediante:

$$V_{\text{HCl}} = \frac{V \cdot PM_{\text{HCl}} \cdot C_{\text{HCl}}}{\rho_{\text{HCl}} \cdot 0,37} \quad (5.3)$$

donde  $V_{\text{HCl}}$  es el volumen de HCl concentrado (L),  $\rho_{\text{HCl}}$  la densidad del HCl (g/L),  $PM_{\text{HCl}}$  el peso molecular del HCl (g/mol),  $C_{\text{HCl}}$  la concentración deseada (M) y  $V$  el volumen total de la solución (L).

Tabla 5.7: Volúmenes de HCl y agua destilada requeridos para la preparación de soluciones.

| Concentración (M) | Volumen de HCl (mL) | Volumen de agua (mL) |
|-------------------|---------------------|----------------------|
| 0,1               | 2,07                | 247,93               |
| 1                 | 20,70               | 229,30               |
| 3                 | 62,11               | 187,89               |
| 5                 | 103,51              | 146,49               |
| 10                | 207,02              | 42,98                |

## 5.7 Determinación de la Capacidad de Adsorción

La determinación de la cantidad de  $\text{CO}_2$  adsorbido se realizó a partir de un balance de materia aplicado al volumen de aire contenido dentro de la cámara experimental. Durante los ensayos, se monitoreó en tiempo real la concentración de  $\text{CO}_2$  mediante el sensor SCD30, registrando su evolución temporal. Debido a que el sistema opera en modo batch y no existe flujo de entrada ni salida de aire durante la etapa de adsorción, la disminución de la concentración de  $\text{CO}_2$  en la fase gaseosa se atribuye directamente a su captura por el material adsorbente. Para facilitar la comparación entre experimentos, se definió la concentración adimensional como:

$$\frac{C}{C_0} \quad (5.4)$$

Donde  $C_0$  corresponde a la concentración inicial de  $\text{CO}_2$  en la cámara y  $C$  a la concentración medida en un tiempo determinado. La fracción removida de  $\text{CO}_2$  se expresó como:

$$1 - \frac{C}{C_0} \quad (5.5)$$

La masa de CO<sub>2</sub> presente en la cámara para cada instante de tiempo se estimó mediante:

$$m_{CO_2}(t) = V_{aire} C_{CO_2}(t) \quad (5.6)$$

Donde  $V_{aire}$  corresponde al volumen interno de aire de la cámara y  $C_{CO_2}(t)$  es la concentración de CO<sub>2</sub> expresada en unidades de masa por volumen.

La masa acumulada de CO<sub>2</sub> adsorbida por el material se obtuvo como la diferencia entre la masa inicial de CO<sub>2</sub> presente en la cámara y la masa remanente en cada instante:

$$m_{ads}(t) = m_{CO_2,0} - m_{CO_2}(t) \quad (5.7)$$

Donde  $m_{CO_2,0}$  corresponde a la masa inicial de CO<sub>2</sub> presente en la cámara experimental.

A partir de la masa adsorbida, se calculó la capacidad de adsorción normalizada por masa de adsorbente ( $q_m$ ) mediante:

$$q_m = \frac{m_{ads}}{m_{adsorbente}} \quad (5.8)$$

Donde  $m_{adsorbente}$  corresponde a la masa total de carbón activado utilizada en cada ensayo. En este trabajo,  $q_m$  se reporta en unidades de mg CO<sub>2</sub>/kg adsorbente.

Adicionalmente, se definió la capacidad de adsorción normalizada por área superficial efectiva del monolito ( $q_A$ ):

$$q_A = \frac{m_{ads}}{A_s} \quad (5.9)$$

Donde  $A_s$  corresponde al área superficial geométrica disponible para la adsorción. Este parámetro permite comparar la eficiencia de utilización de la superficie entre distintas configuraciones monolíticas. Finalmente, para cada diseño se reportaron los valores máximos de  $q_m$  y  $q_A$  alcanzados al final de cada ensayo, permitiendo comparar el desempeño de las distintas geometrías evaluadas.

# Capítulo 6

## Resultados

### 6.1 Rendimiento entre Morfología Monolítica y Granular

En la Figura 6.1 se presentan las curvas de captura de  $\text{CO}_2$  obtenidas durante la primera corrida experimental, donde se comparan los diferentes diseños monolíticos evaluados con la forma granular del carbón activado. A diferencia de una curva de ruptura convencional en lecho fijo continuo, en este estudio la disminución de concentración de  $\text{CO}_2$  se registra desde el inicio del ensayo debido a la naturaleza batch del sistema experimental, donde el volumen de aire permanece contenido dentro de la cámara de adsorción y el adsorbente comienza a captar  $\text{CO}_2$  inmediatamente. A partir de estos datos, se calcularon dos indicadores de desempeño: la capacidad de adsorción por masa de adsorbente  $q_m$ , en  $\text{mg CO}_2/\text{kg}_{CA}$ , y la capacidad normalizada por área superficial disponible  $q_A$ , en  $\text{mg CO}_2/\text{m}^2$ . En este caso, el área utilizada para la normalización corresponde al área interna efectiva expuesta al flujo de gas y disponible para la adsorción de  $\text{CO}_2$ , determinada a partir de la geometría del monolito. Esta representación permite distinguir entre efectos asociados a la cantidad total de material y aquellos vinculados a la eficiencia intrínseca del área de contacto del monolito.

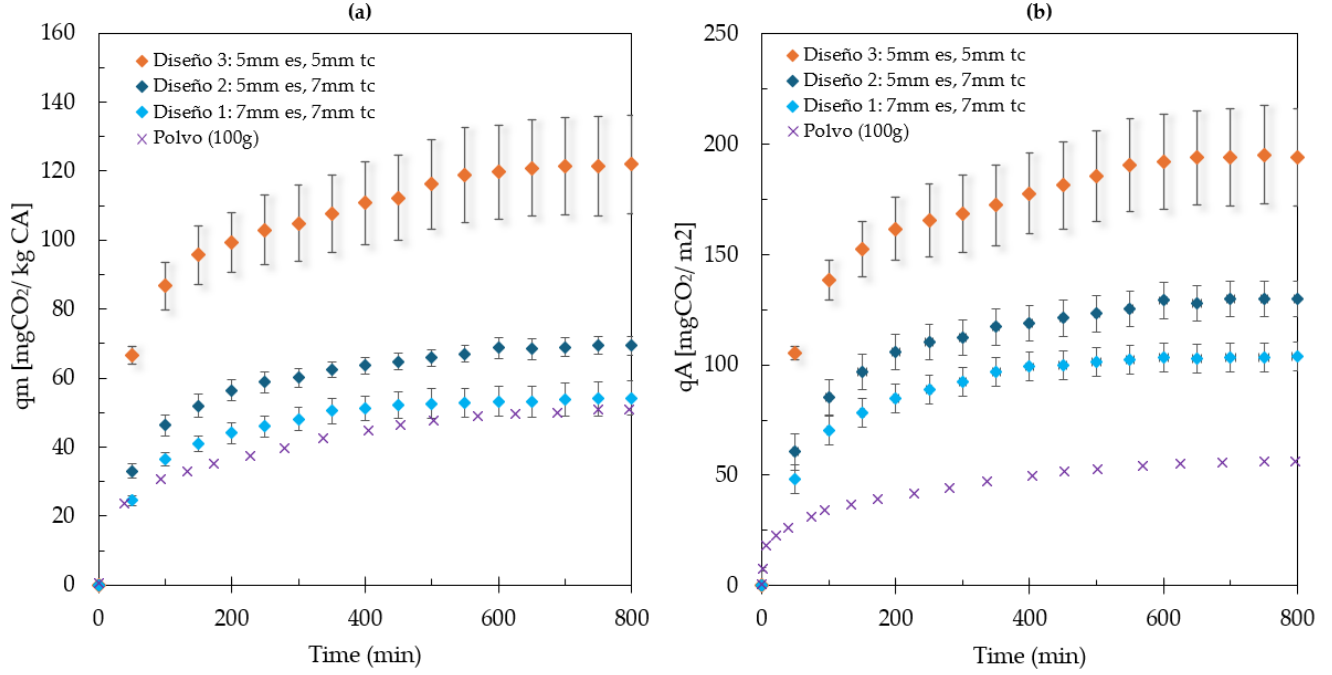


Figura 6.1: Curvas de ruptura obtenidas del diseño 1, 2 y 3, y la forma granular en función del (a) adsorción normalizada por masa y (b) adsorción normalizada por área.

El diseño con espesor de 5 mm y tamaño de canal de 5 mm (Diseño 3) presentó el mejor desempeño global, alcanzando en promedio un  $q_m = 101.7$  mg CO<sub>2</sub>/kg<sub>CA</sub> y  $q_A = 226.9$  mg CO<sub>2</sub>/m<sup>2</sup>. Esta superioridad refleja una mayor relación área/volumen efectiva, que favorece la difusión del gas hacia los sitios activos y maximiza la utilización del área de adsorción, en concordancia con lo reportado para monolitos estructurados en la literatura [67].

La forma granular, evaluada en una caja de 30 × 30 cm con una altura de lecho de 2,5 mm y una masa de 100 g, mostró un desempeño intermedio con  $q_m = 55.6$  mg CO<sub>2</sub>/kg<sub>CA</sub> y  $q_A = 169.8$  mg CO<sub>2</sub>/m<sup>2</sup>. A pesar de presentar un tiempo característico de captura comparable ( $\approx 450$  min), se observó una menor eficiencia de adsorción respecto de algunos diseños monolíticos. Este comportamiento podría estar asociado a fenómenos de aglomeración parcial del carbón granular y a heterogeneidades en el empaquetamiento, los cuales reducen la accesibilidad efectiva del CO<sub>2</sub> hacia parte de la superficie interna disponible. Adicionalmente, dentro de la ventana temporal experimental evaluada, es probable que las resistencias difusivas entre partículas hayan influido sobre la velocidad de transferencia de masa, disminuyendo la utilización efectiva del adsorbente durante el ensayo. En sistemas batch como el utilizado en este trabajo, estas limitaciones tienden a manifestarse principalmente en la cinética de captura y en el tiempo requerido para aproximarse al

equilibrio, más que en la capacidad de equilibrio teórica a tiempos suficientemente largos. Este efecto dispersivo es característico de lechos granulares, donde la distribución no uniforme del gas y las trayectorias difusivas más complejas suavizan la pendiente de las curvas de captura de  $\text{CO}_2$ .

Por el contrario, los diseños con espesor de pared de 7 mm mostraron una capacidad de adsorción inferior, especialmente el diseño con canal de 7 mm (Diseño 1), que alcanzó  $q_m = 45.1 \text{ mg CO}_2/\text{kg}_{CA}$  y  $q_A = 142.3 \text{ mg CO}_2/\text{m}^2$ . Este resultado evidencia que un aumento del espesor de pared incrementa la resistencia difusiva interna del  $\text{CO}_2$ , reduciendo la eficiencia de captura por unidad de área. La Tabla 6.1 resume los principales indicadores calculados tanto por masa como por área disponible.

Tabla 6.1: Resultados comparativos de la primera corrida experimental de adsorción de  $\text{CO}_2$ , expresados por masa, área superficial y condiciones ambientales.

| Parámetro                                    | Diseño 1 | Diseño 2 | Diseño 3 | Granular |
|----------------------------------------------|----------|----------|----------|----------|
| Espesor (mm)                                 | 7        | 7        | 5        | –        |
| Tamaño de canal (mm)                         | 7        | 5        | 5        | –        |
| $\bar{q}_m$ (mg $\text{CO}_2/\text{kg CA}$ ) | 54.13    | 69.37    | 122.01   | 50.80    |
| $\bar{q}_A$ (mg $\text{CO}_2/\text{m}^2$ )   | 103.69   | 129.71   | 193.81   | 56.44    |
| Tiempo de ruptura (min)                      | 450      | 548      | 264      | 448      |
| Eficiencia $\eta$ ( $C/C_0$ )                | 18 %     | 17 %     | 23 %     | 9 %      |
| Humedad relativa promedio (%HR)              | 24.42    | 23.46    | 22.21    | 33.5     |
| Temperatura promedio ( $^\circ\text{C}$ )    | 18.45    | 17.75    | 17.38    | 21.4     |

Si bien todas las configuraciones evaluadas presentan una tendencia asintótica en sus curvas de captura, esto no implica necesariamente que todo el volumen de carbón activado haya alcanzado una saturación completa de  $\text{CO}_2$ . En las condiciones experimentales utilizadas, la asíntota observada representa el estado alcanzado por el sistema dentro del tiempo experimental disponible. En este contexto, la geometría del pellet monolítico puede influir sobre la utilización efectiva del adsorbente al modificar parámetros macroscópicos como el tamaño de canal, el espesor de pared y la uniformidad geométrica de la estructura. Diseños que presentan estrechamientos locales, deformaciones o canales parcialmente obstruidos pueden dificultar el acceso homogéneo del  $\text{CO}_2$  a todas las regiones internas del monolito, reduciendo la fracción efectiva de superficie y volumen de carbón que participa en la adsorción. Como consecuencia, aunque la concentración de  $\text{CO}_2$  en la cámara experimental tienda a estabilizarse, una parte del adsorbente podría permanecer subutilizada. Por el contrario, configuraciones con una geometría más uniforme y una distribución más homogénea de canales favorecen una mejor utilización del volumen adsorbente disponible, permitiendo alcanzar mayores capacidades de captura experimental. Por esta razón, la morfología monolítica puede afectar no sólo el comportamiento de las curvas de captura, sino también la

capacidad efectiva de adsorción obtenida bajo las condiciones de operación evaluadas.

## 6.2 Influencia del Espesor de Pared y Tamaño de Canal

### 6.2.1 Influencia del espesor de pared

La Figura 6.2 muestra la comparación entre los diseños con un mismo tamaño de canal (5 mm) pero diferente espesor de pared (5 mm vs. 7 mm). En ambos casos, se observó un aumento en la capacidad de adsorción tanto por masa como por área al reducir el espesor de pared dentro de la ventana temporal experimental evaluada. El diseño de 5 mm alcanzó valores de  $q_m = 101,7\text{--}153,9$  mg CO<sub>2</sub>/kg CA y  $q_A = 226,9\text{--}360,9$  mg CO<sub>2</sub>/m<sup>2</sup>, mientras que el diseño de 7 mm presentó valores de  $q_m = 74,8\text{--}82,7$  mg CO<sub>2</sub>/kg CA y  $q_A = 203,8\text{--}237,0$  mg CO<sub>2</sub>/m<sup>2</sup>.

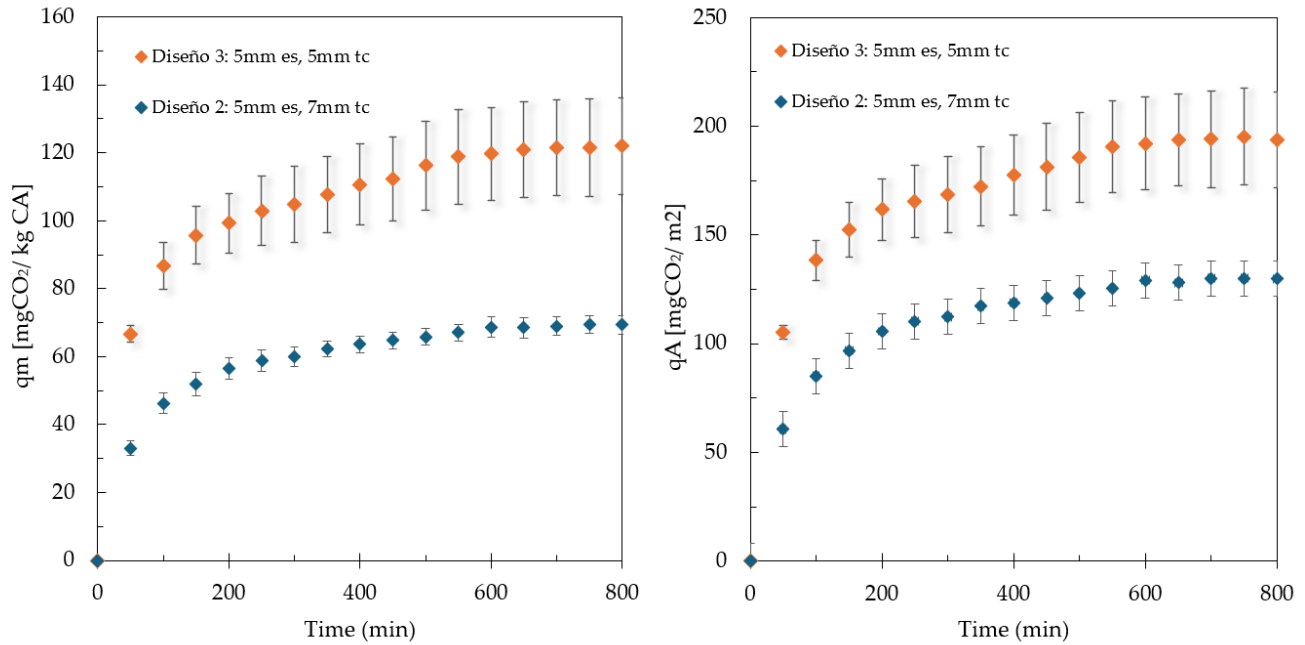


Figura 6.2: Curvas de ruptura obtenidas para los diseños con tamaño de canal de 5 mm y diferente espesor de pared: Diseño 2 (espesor de 7 mm,  $S/V = 138.9$  m<sup>2</sup>/m<sup>3</sup>) y Diseño 3 (espesor de 5 mm,  $S/V = 200$  m<sup>2</sup>/m<sup>3</sup>), en función de (a) adsorción normalizada por masa y (b) adsorción normalizada por área.

La diferencia observada se asocia principalmente al efecto geométrico del espesor sobre la

accesibilidad difusiva y el área efectiva de contacto gas-sólido. Al disminuir el espesor de pared, aumenta la fracción de vacío y la superficie accesible por unidad de volumen, favoreciendo una distribución más homogénea del  $\text{CO}_2$  dentro de los canales y reduciendo la distancia de difusión hacia los sitios activos del carbón activado. Esto permite una utilización más rápida del adsorbente durante el tiempo experimental considerado. No obstante, dado que los ensayos fueron realizados en un sistema batch y todos los diseños tienden eventualmente a aproximarse a una asíntota de captura, las diferencias observadas deben interpretarse principalmente como efectos cinéticos asociados a la velocidad de transporte y ocupación de los sitios adsorbentes, más que como diferencias absolutas de capacidad de equilibrio.

Adicionalmente, no puede descartarse completamente la influencia de otros factores asociados al proceso de fabricación, como el tratamiento térmico, la compactación del pellet o la presencia del aglomerante CMC utilizado en la conformación de los monolitos. En particular, un exceso de aglomerante podría potencialmente bloquear parte de la microporosidad o generar resistencias adicionales a la difusión interna. Sin embargo la reproducibilidad observada entre réplicas sugieren que el contenido de CMC utilizado no produjo una obstrucción significativa de la estructura porosa activa del carbón activado. Esto indica que las diferencias observadas entre diseños se encuentran dominadas principalmente por efectos geométricos y de transferencia de masa asociados a la morfología interna del monolito.

### 6.2.2 Influencia del tamaño de canal

La Figura 6.3 compara los monolitos con igual espesor (7 mm) y distinto tamaño de canal (5 mm vs. 7 mm). La reducción del canal de 7 mm a 5 mm incrementó la capacidad de adsorción por masa desde  $q_m = 45.1\text{--}70.5$  mg  $\text{CO}_2/\text{kg CA}$  hasta  $q_m = 74.8\text{--}82.7$  mg  $\text{CO}_2/\text{kg CA}$ , mientras que la capacidad por área superficial aumentó de  $q_A = 142.3\text{--}212.0$  mg  $\text{CO}_2/\text{m}^2$  a  $q_A = 203.8\text{--}237.0$  mg  $\text{CO}_2/\text{m}^2$ .

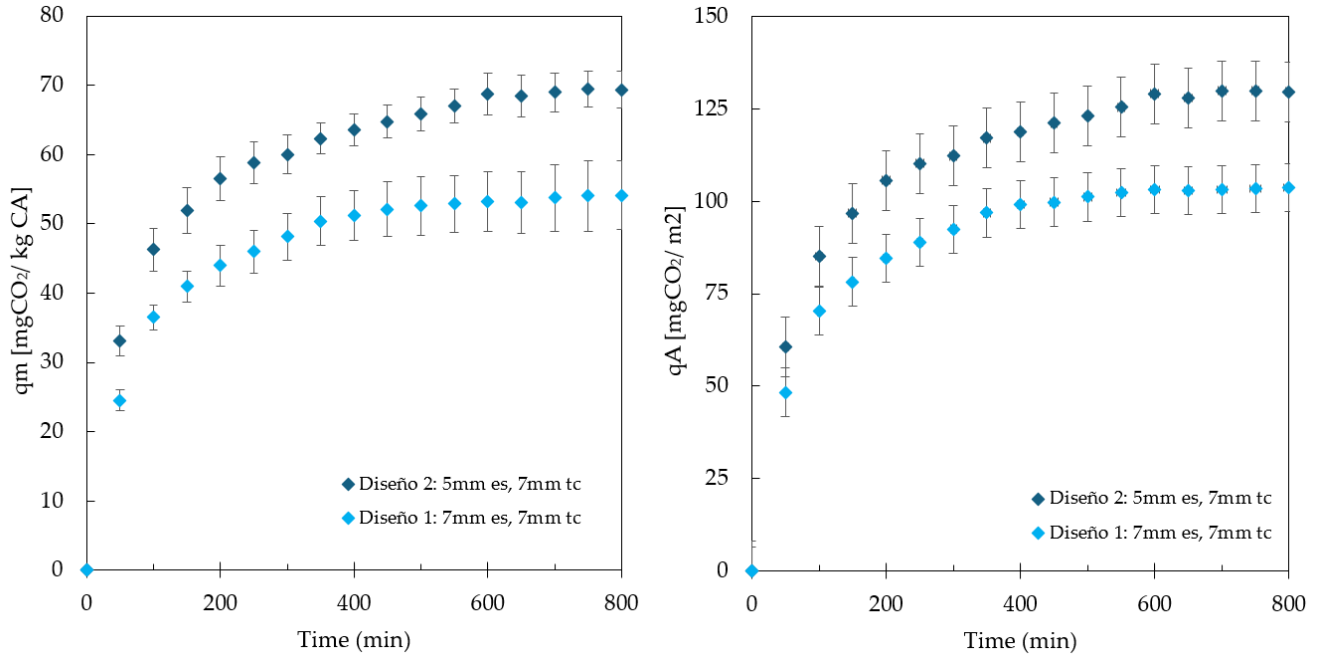


Figura 6.3: Curvas de ruptura obtenidas para los diseños con espesor de pared de 7 mm y diferente tamaño de canal: Diseño 1 (canal de 7 mm,  $S/V = 142.9 \text{ m}^2/\text{m}^3$ ) y Diseño 2 (canal de 5 mm,  $S/V = 138.9 \text{ m}^2/\text{m}^3$ ), en función de (a) adsorción normalizada por masa y (b) adsorción normalizada por área.

Estos resultados proveen evidencia que una disminución en el tamaño de canal mejora la eficiencia de transferencia de masa entre la fase gaseosa y el adsorbente, debido a un mayor cociente área/volumen y una reducción de la distancia de difusión hacia las paredes activas. En consecuencia, la fracción de CO<sub>2</sub> que logra alcanzar los sitios activos aumenta, traduciéndose en una mayor capacidad tanto por masa ( $q_m$ ) como por área ( $q_A$ ).

Adicionalmente, los monolitos con canales más estrechos mostraron curvas de ruptura más extendidas, lo que indica una mayor estabilidad del frente de adsorción y una utilización más homogénea del material activo a lo largo del canal. Sin embargo, es importante destacar que el aumento de la fricción fluido-pared asociado a canales reducidos puede generar una mayor caída de presión, lo que representa un compromiso entre capacidad de captura y eficiencia hidráulica. Por tanto, el diseño óptimo del tamaño de canal debe considerar simultáneamente la cinética de adsorción y las pérdidas energéticas del sistema, especialmente en escalas industriales.

## 6.3 Influencia de la Geometría Interna en la Capacidad de Adsorción

En esta sección se analizan los resultados experimentales considerando el efecto de la densidad de celda sobre la capacidad de adsorción de  $\text{CO}_2$ .

### 6.3.1 Efecto de la densidad de celda

La Figura 6.4 ilustra la tendencia obtenida en cuanto a la capacidad de captura en función de la densidad de celda.

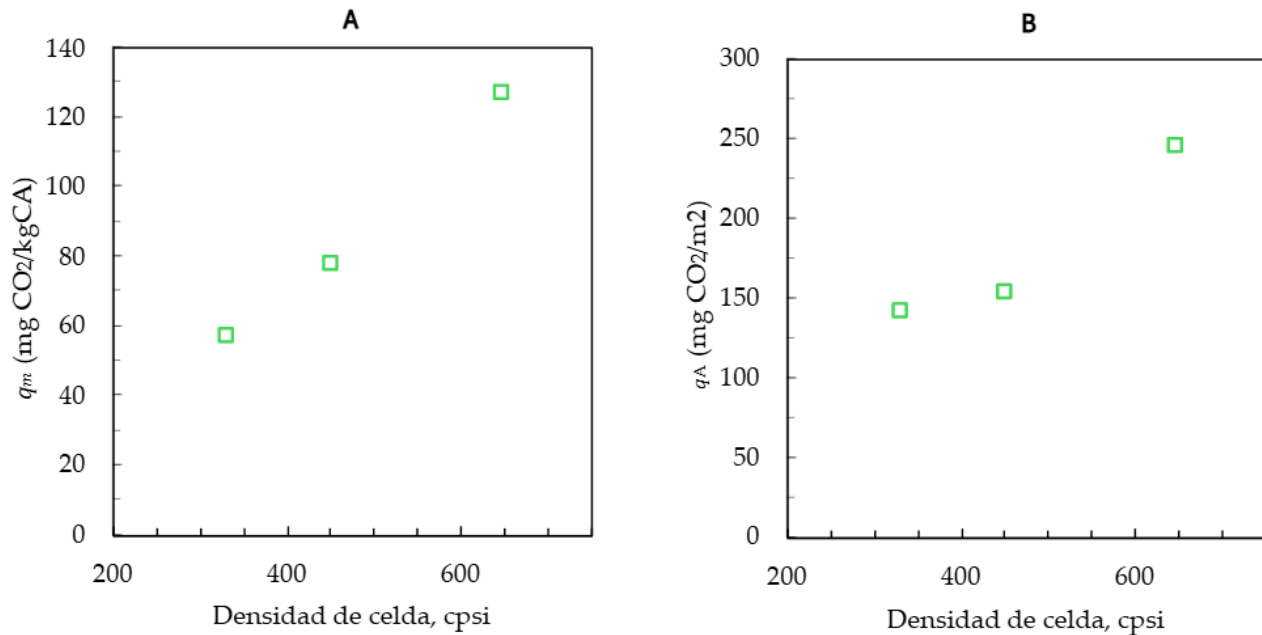


Figura 6.4: Relación entre densidad de celda y capacidad de adsorción ( $q$ ) normalizada por masa (A) y normalizada por área (B).

El diseño con 329 *cpsi* alcanzó una capacidad promedio de 57,8  $\text{mg CO}_2/\text{kg CA}$ , mientras que el diseño de 448 *cpsi* llegó a 89,2  $\text{mg CO}_2/\text{kg CA}$ , y finalmente el diseño de 645 *cpsi* logró 117,9  $\text{mg CO}_2/\text{kg CA}$ . Esta tendencia confirma que una mayor densidad de celda incrementa el número de canales por unidad de área y, por lo tanto, la superficie disponible para el contacto gas-sólido.

### 6.3.2 Efecto del área superficial por volumen

La Figura 6.5 la capacidad de captura en función del área superficial por volumen.

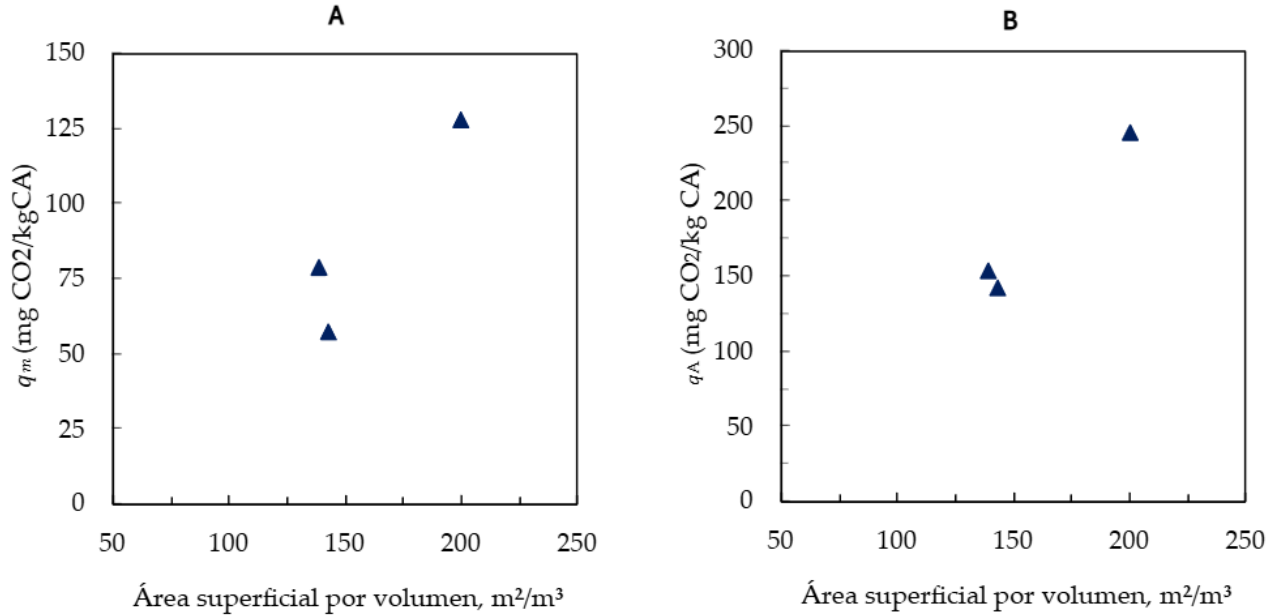


Figura 6.5: Relación entre densidad de celda y capacidad de adsorción ( $q$ ) normalizada por masa (A) y normalizada por área (B).

Tabla 6.2: Resultados experimentales en función de parámetros morfológicos.

| $D$ , mm | $w$ , mm | $D + w$ , m | $S/V$ , m <sup>2</sup> /m <sup>3</sup> | CD, <i>cpsi</i> | $q_{exp}$ , mg CO <sub>2</sub> /kg CA |
|----------|----------|-------------|----------------------------------------|-----------------|---------------------------------------|
| 7        | 7        | 0.014       | 142.86                                 | 329             | 57.82                                 |
| 5        | 7        | 0.012       | 138.89                                 | 448             | 89.23                                 |
| 5        | 5        | 0.010       | 200.00                                 | 645             | 117.89                                |

Aunque los diseños 1 y 2 presentan valores de área superficial por volumen ( $S/V$ ) similares (142.9 y 138.9 m<sup>2</sup>/m<sup>3</sup>), sus resultados de adsorción difieren notablemente, evidenciando que la densidad de celda ejerce un rol más determinante que el  $S/V$  en este rango geométrico. Por su parte, el diseño 3, con la mayor densidad de celda (645 *cpsi*) y el mayor  $S/V$  (200 m<sup>2</sup>/m<sup>3</sup>), obtuvo también la mayor capacidad de captura, consolidando esta relación. Este comportamiento se atribuye a la mayor área superficial expuesta al flujo de aire en monolitos con mayor densidad de celda, lo que incrementa el número de sitios activos disponibles para la adsorción de CO<sub>2</sub>. Estos hallazgos sugieren que la densidad de celda es un parámetro crítico en la optimización del diseño monolítico. Sin embargo, el incremento de densidad podría implicar mayores caídas de presión, lo que plantea la necesidad de un balance entre área disponible, cinética de captura y pérdidas de carga.

## 6.4 Análisis de Morfología Interna con Mayor Área Superficial por Volumen

El estudio experimental se estructuró en dos etapas complementarias. La primera etapa tuvo un carácter exploratorio y estuvo orientada a comparar distintas configuraciones monolíticas frente al carbón activado granular convencional, evaluando cómo variaciones en el tamaño de canal y espesor de pared influían sobre el desempeño de adsorción de  $\text{CO}_2$ . En esta fase inicial se buscó identificar tendencias generales entre la morfología macroscópica del monolito y la capacidad de captura, considerando que parámetros como el espesor de pared y el tamaño de canal modifican simultáneamente el área geométrica disponible para adsorción, el volumen libre de paso del flujo y la relación área superficial–volumen ( $S/V$ ) de la estructura.

A partir de los resultados obtenidos, se observó una tendencia general de mejora en la capacidad de captura al incrementar la relación  $S/V$  del monolito, sugiriendo que estructuras con mayor área superficial por unidad de volumen favorecen el contacto gas–sólido durante el proceso de adsorción. Sin embargo, debido a que en los primeros diseños múltiples variables geométricas cambiaban simultáneamente, no fue posible determinar con claridad si el aumento en el rendimiento estaba asociado específicamente a la relación  $S/V$  o a otras modificaciones estructurales derivadas de la geometría interna del monolito.

En consecuencia, se desarrolló una segunda etapa experimental enfocada en analizar de manera más específica la influencia de la geometría macroscópica del monolito sobre el rendimiento de captura de  $\text{CO}_2$ , priorizando configuraciones con distintas relaciones  $S/V$  y menor interferencia entre variables geométricas. Para ello, se diseñaron estructuras con igual densidad de celdas por sección transversal, permitiendo comparar monolitos con diferente área geométrica disponible por unidad de volumen sin modificar significativamente la distribución global del flujo dentro de la estructura. Adicionalmente, se incorporó una configuración correspondiente a la máxima relación  $S/V$  que podía fabricarse manteniendo una resistencia mecánica adecuada en los pellets monolíticos obtenidos mediante moldes impresos en 3D. De esta manera, la segunda etapa experimental permitió evaluar si la tendencia de mejora observada en los primeros diseños continuaba al incrementar progresivamente la relación área superficial–volumen de la estructura monolítica.

### 6.4.1 Diseño experimental

Para esta segunda etapa experimental se seleccionaron tres pellets monolíticos con distintas configuraciones de espesor de pared y tamaño de canal: 4/4, 3/5 y 3/3. Los diseños 4/4 y 3/5 fueron desarrollados para mantener una densidad de celdas equivalente, modificando principalmente la relación área superficial–volumen ( $S/V$ ). De esta manera, fue posible comparar estructuras con igual número de canales por sección transversal, pero con diferente área geométrica disponible por unidad de volumen para el contacto gas–sólido. Adicionalmente, se incorporó el diseño 3/3, correspondiente a la mayor relación  $S/V$  que podía fabricarse manteniendo una resistencia mecánica adecuada en los moldes impresos en 3D utilizados en este estudio. La inclusión de esta configuración permitió evaluar si la tendencia observada en la etapa exploratoria inicial continuaba al incrementar aún más el área geométrica disponible para la adsorción de  $\text{CO}_2$ . Este diseño permitió separar dos efectos que normalmente se superponen: (i) el incremento del área superficial teórica asociado a canales más estrechos y paredes más delgadas, y (ii) la capacidad real del flujo para aprovechar dicha área.

Tabla 6.3: Parámetros morfológicos complementarios del segundo diseño experimental

| Parámetro                                             | Diseño 4 | Diseño 5 | Diseño 6 |
|-------------------------------------------------------|----------|----------|----------|
| Canal, mm                                             | 4        | 5        | 3        |
| Espesor de pared, mm                                  | 4        | 3        | 3        |
| Celda total ( $D+w$ ), mm                             | 8        | 8        | 6        |
| Masa pellet inicial, g                                | 68       | 58       | 75       |
| Densidad de celda, cpsi                               | 1008     | 1008     | 1792     |
| Área superficial por volumen, $\text{m}^2/\text{m}^3$ | 250      | 312.5    | 333.3    |
| Área efectiva de contacto, $\text{m}^2$               | 0.0564   | 0.0598   | 0.0682   |
| Número de canales                                     | 52       | 45       | 89       |

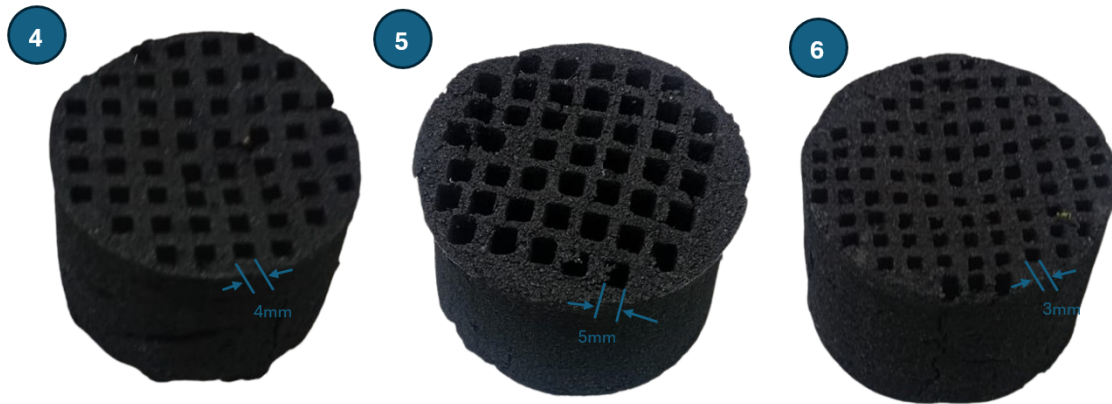


Figura 6.6: Diseños elaborados para el segundo set experimental

El pellet 3/3 corresponde a la configuración con el menor espesor de pared y el tamaño de canal más pequeño que fue posible fabricar manteniendo la resistencia mecánica mínima requerida para su manipulación. Esta geometría maximiza la relación área superficial–volumen ( $S/V$ ) dentro de las limitaciones estructurales del material, y por ello se incluyó como referencia del límite inferior geométrico alcanzable en este estudio. Por otra parte, los pellets 4/4 y 3/5 fueron seleccionados específicamente para mantener una densidad de celdas equivalente, permitiendo comparar únicamente el efecto del área superficial por volumen ( $S/V$ ) sin modificar el número total de canales por sección transversal. Esta comparación aislada es fundamental para identificar si, a densidad de celda constante, la variación simultánea de espesor de pared y tamaño de canal modifica la accesibilidad del  $\text{CO}_2$  a los sitios activos.

Tabla 6.4: Segundo diseño experimental: pellets con igual densidad de celdas y distinta morfología interna

| N° | Diseño | Forma    | Espesor<br>(mm) | Tamaño<br>canal<br>(mm) | Temperatura<br>(°C) | Humedad<br>(%)   |
|----|--------|----------|-----------------|-------------------------|---------------------|------------------|
| E1 | 4      | Monolito | 4               | 4                       | Temp <sub>1</sub>   | Hum <sub>1</sub> |
| E2 | 4      | Monolito | 4               | 4                       | Temp <sub>2</sub>   | Hum <sub>2</sub> |
| F1 | 5      | Monolito | 3               | 5                       | Temp <sub>3</sub>   | Hum <sub>3</sub> |
| F2 | 5      | Monolito | 3               | 5                       | Temp <sub>4</sub>   | Hum <sub>4</sub> |
| G1 | 6      | Monolito | 3               | 3                       | Temp <sub>5</sub>   | Hum <sub>5</sub> |
| G2 | 6      | Monolito | 3               | 3                       | Temp <sub>6</sub>   | Hum <sub>6</sub> |

En este capítulo no se consideró explícitamente el número total de canales como variable comparativa, ya que la densidad de celdas (cpsi), mantenida constante entre los pellets 4/4 y 3/5, ya determina indirectamente esta magnitud. Al controlar la densidad de celdas, el número de canales deja de ser un parámetro independiente, permitiendo aislar y evaluar únicamente el efecto geométrico del espesor de pared y tamaño de canal sobre la relación área superficial–volumen ( $S/V$ ) y, por ende, sobre la capacidad de adsorción.

#### 6.4.2 Influencia del área superficial por volumen a misma densidad de celda

Para evaluar el efecto específico del área superficial por volumen ( $S/V$ ) manteniendo constante la densidad de celda, se analizaron los resultados experimentales obtenidos para los pellets correspondientes al diseño 4 y al diseño 5, de acuerdo a la Tabla 6.4. Ambos presentan la

misma densidad de celdas, pero difieren en su geometría: el diseño 4 posee un espesor de pared de 4 mm y un tamaño de canal de 4 mm, mientras que el diseño 5 reduce el espesor a 3 mm y aumenta el tamaño de canal a 5 mm. Este ajuste geométrico incrementa el valor de  $S/V$  desde  $250 \text{ m}^2/\text{m}^3$  (diseño 4) hasta  $312.5 \text{ m}^2/\text{m}^3$  (diseño 5), constituyendo un caso adecuado para aislar el efecto de este parámetro.

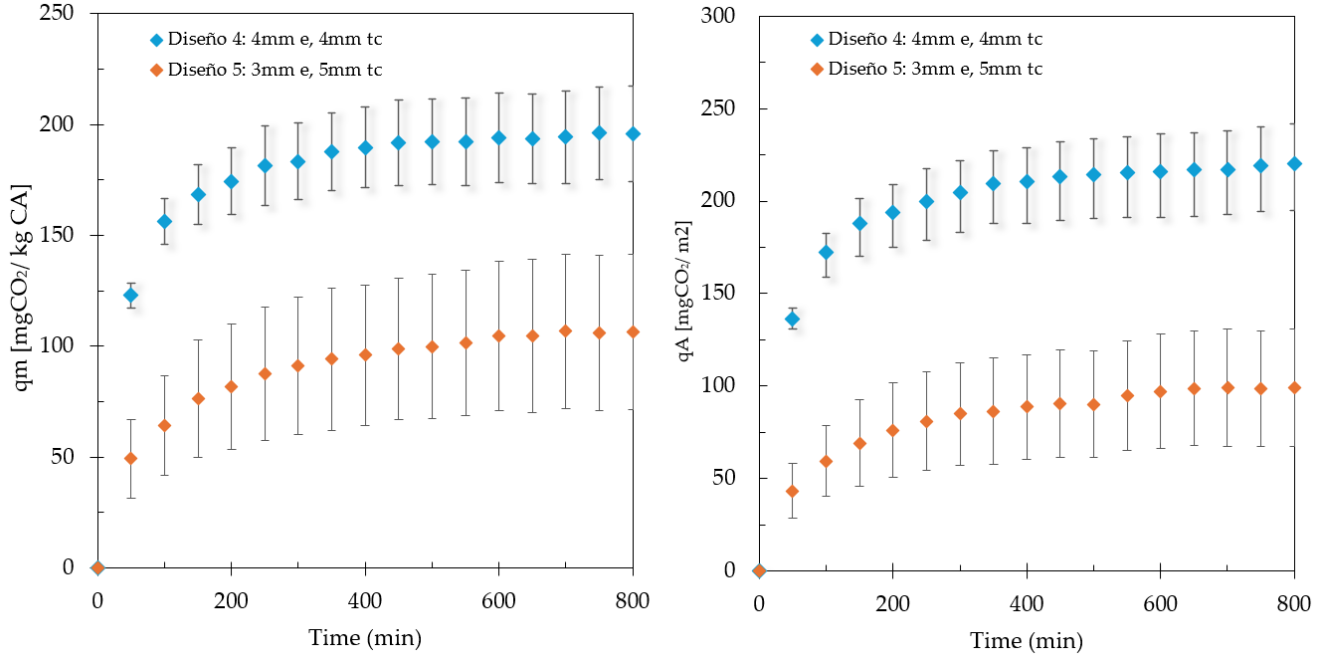


Figura 6.7: Curvas de ruptura obtenidas del diseño 4 y 5 en función de (a) adsorción normalizada por masa y (b) adsorción normalizada por área.

A pesar de que el diseño 5 presenta un valor teórico de  $S/V$  mayor, los resultados experimentales muestran de manera consistente que el diseño 4 alcanza una capacidad de adsorción superior, tanto normalizada por masa como por área. Este resultado indica que, bajo las condiciones experimentales evaluadas, la relación  $S/V$  por sí sola no es suficiente para describir el desempeño real del pellet monolítico, ya que factores asociados a la distribución efectiva del adsorbente y a la accesibilidad de la superficie interna también influyen significativamente en la captura de CO<sub>2</sub>.

Una posible explicación es que el menor espesor de pared del diseño 5 implica una menor cantidad de carbón activado disponible alrededor de cada canal, favoreciendo una saturación más rápida de las zonas adsorbentes durante el tiempo experimental evaluado. En contraste, el diseño 4 posee paredes más gruesas, proporcionando una mayor masa efectiva de adsorbente y permitiendo mantener la captura de CO<sub>2</sub> durante tiempos más prolongados. Asimismo, el proceso de compactación y conformación del pellet podría haber afectado parcialmente la red de poros del carbón activado en las paredes más delgadas, disminuyendo la accesibilidad a parte de la microporosidad disponible.

Los resultados sugieren que el desempeño de los pellets monolíticos no depende únicamente del área superficial geométrica teórica, sino también de la cantidad efectiva de adsorbente disponible y de la fracción de superficie realmente accesible bajo condiciones experimentales. El diseño 4 presenta un equilibrio más favorable entre área superficial accesible, estabilidad geométrica y masa efectiva de carbón activado, lo que se traduce en una mayor capacidad de captura observada experimentalmente.

### 6.4.3 Rendimiento del diseño con mayor área superficial por volumen

El diseño 6, caracterizado por un tamaño de canal de 3 mm y un espesor de pared de 3 mm, presenta el mayor valor teórico de relación área superficial-volumen ( $S/V = 333.3 \text{ m}^2/\text{m}^3$ ) entre todos los pellets evaluados. Sin embargo, su desempeño experimental no superó al del diseño 4 y, en algunos ensayos, incluso resultó inferior al diseño 5. Este comportamiento indica que un aumento teórico de la relación  $S/V$  no necesariamente se traduce en una mejora efectiva de la capacidad de captura cuando existen limitaciones geométricas asociadas al flujo y acceso del  $\text{CO}_2$  dentro de la estructura monolítica.

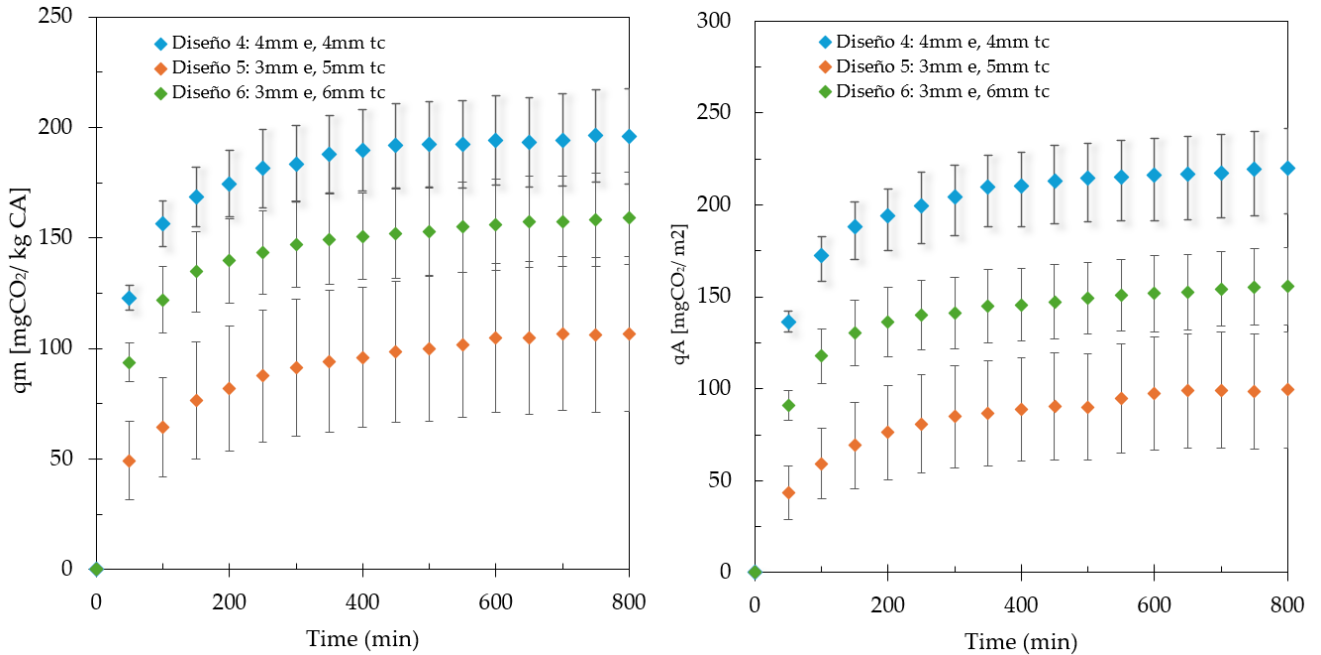


Figura 6.8: Curvas de ruptura obtenidas para los diseños 6, 5 y 4 en función de (a) adsorción normalizada por masa y (b) adsorción normalizada por área.

Bajo las condiciones experimentales utilizadas, el transporte de  $\text{CO}_2$  hacia la superficie adsorbente

ocurre principalmente mediante difusión molecular en aire prácticamente estancado al interior de los canales del monolito. De manera conceptual, el flujo difusivo puede describirse mediante la ley de Fick:

$$J = -D_g \frac{\partial C}{\partial x} \quad (6.1)$$

Donde  $J$  corresponde al flujo molar difusivo de  $\text{CO}_2$ ,  $D_g$  representa el coeficiente de difusión del  $\text{CO}_2$  en la fase gaseosa y  $\partial C/\partial x$  corresponde al gradiente de concentración entre el volumen de aire y la superficie adsorbente.

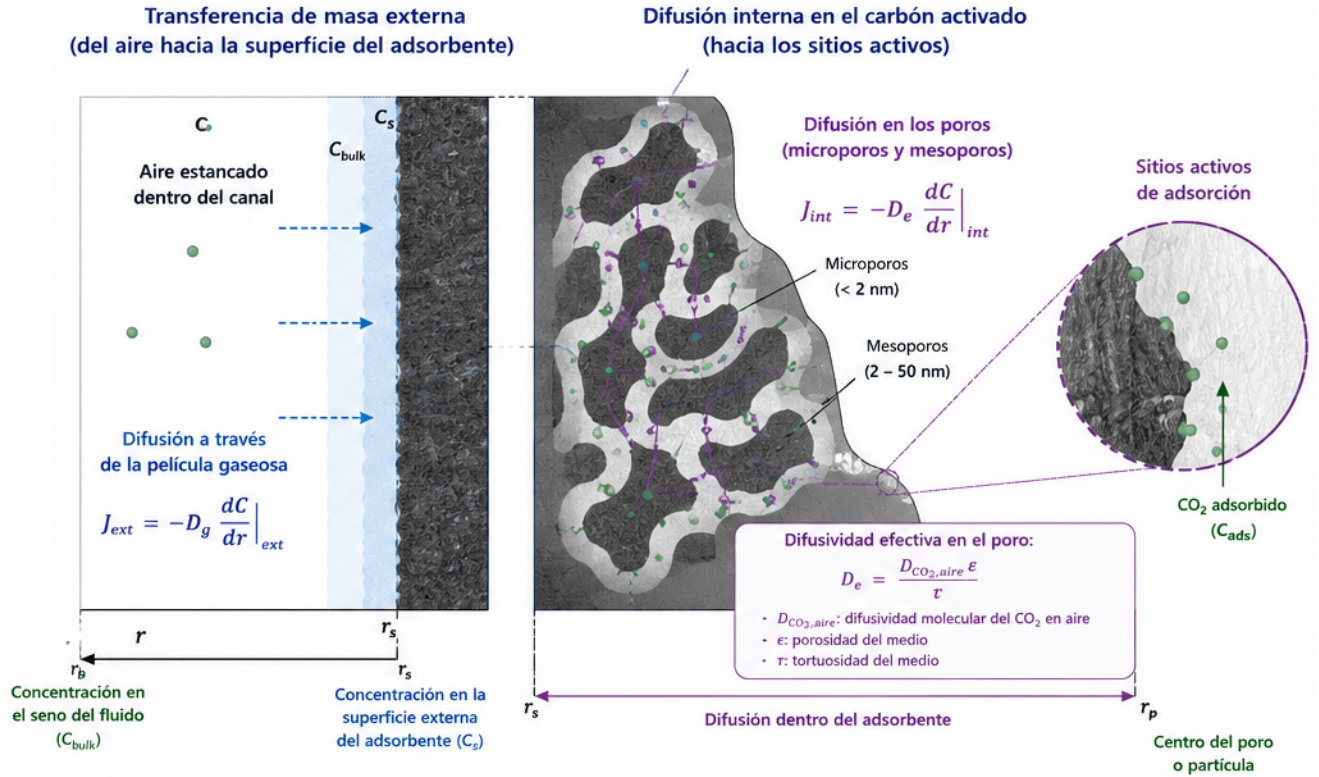


Figura 6.9: Esquema conceptual de las etapas de transferencia de masa durante la captura de  $\text{CO}_2$  en pellets monolíticos de carbón activado (elaboración propia basada en los mecanismos de transferencia de masa descritos por [58]).

La Figura 6.9 presenta un esquema conceptual de las etapas de transferencia de masa involucradas en la captura de  $\text{CO}_2$ , elaborado a partir de los mecanismos de adsorción y transporte reportados en literatura [58]. El esquema también incluye de manera conceptual las resistencias internas asociadas al transporte intraparticular dentro de la estructura porosa del carbón activado. En medios porosos, la difusividad efectiva suele expresarse mediante:

$$D_e = D_m \epsilon \quad (6.2)$$

Donde  $D_e$  corresponde a la difusividad efectiva del  $\text{CO}_2$  dentro del medio poroso,  $D_m$  es la difusividad molecular del  $\text{CO}_2$  en aire y  $\varepsilon$  representa la porosidad accesible del material. No obstante, parámetros como la difusividad efectiva, la porosidad efectiva o los mecanismos de transporte en microporos y mesoporos no fueron cuantificados experimentalmente en este estudio, por lo que el esquema se presenta únicamente con fines ilustrativos para describir las etapas generales de transferencia de masa involucradas en el proceso de adsorción.

En el caso del diseño 6, caracterizado por una elevada densidad de canales (89 canales) y un reducido espesor de pared de 3 mm, la fabricación artesanal mediante moldes impresos en 3D generó una mayor susceptibilidad a imperfecciones geométricas respecto a los otros diseños evaluados. Durante la inspección experimental se observaron deformaciones locales, estrechamientos parciales de canales, variaciones dimensionales entre secciones internas del pellet, acumulación localizada de material aglomerante en algunas intersecciones, bordes irregulares en las paredes internas y presencia de microfisuras superficiales, como se observa en la Figura 6.10. Asimismo, algunos canales presentaron obstrucciones parciales e incluso reducciones importantes de su sección transversal efectiva, lo que podría disminuir localmente el área disponible para el flujo de aire y el transporte de  $\text{CO}_2$ .

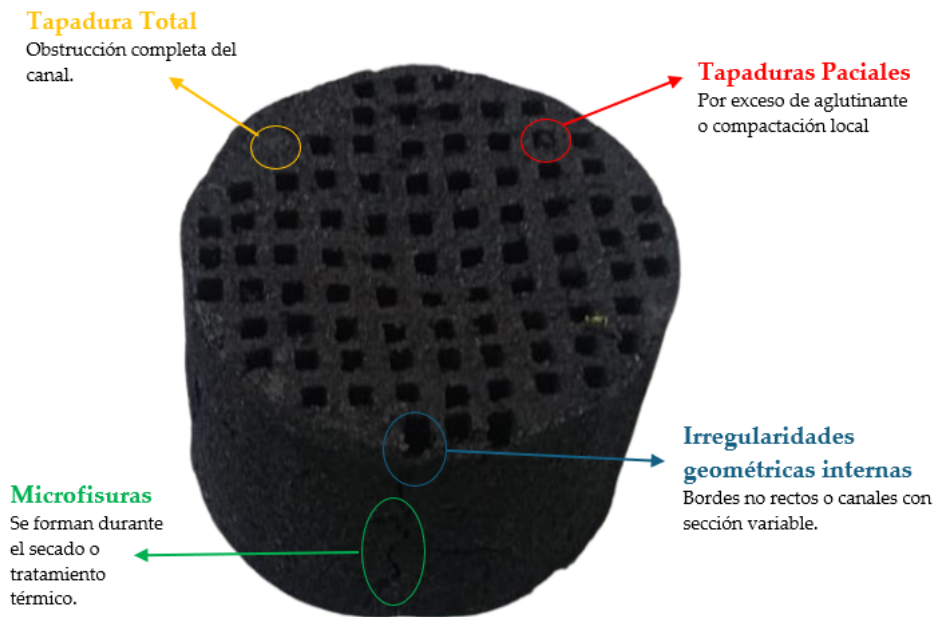


Figura 6.10: Imperfecciones geométricas observadas en el diseño 6.

Estas irregularidades geométricas habrían afectado el acceso del aire al interior de ciertos canales, disminuyendo la accesibilidad efectiva del flujo gaseoso hacia parte de la superficie adsorbente

disponible. Si bien este tipo de deformaciones e imperfecciones geométricas se observaron en distinta medida en los tres diseños evaluados de esta segunda etapa experimental, su presencia fue considerablemente más evidente en los diseños 5 y 6, los cuales presentaban menores espesores de pared y una mayor densidad de canales. Bajo las condiciones experimentales utilizadas, donde el transporte de  $\text{CO}_2$  ocurre predominantemente mediante difusión molecular en aire prácticamente estancado, reducciones locales de sección transversal, deformaciones de canales o zonas parcialmente obstruidas pueden aumentar la resistencia externa a la transferencia de masa entre el volumen gaseoso y la superficie del carbón activado. Como consecuencia, parte del área geométrica teórica del diseño 6 podría no haber participado completamente en el proceso de adsorción durante el tiempo experimental evaluado.

Este comportamiento resulta consistente con los resultados obtenidos experimentalmente, donde el diseño 6 presentó menores reducciones de concentración de  $\text{CO}_2$  y valores de  $q_A$  inferiores a los esperados según su elevada relación teórica  $S/V$ . Lo anterior sugiere que, para geometrías con relaciones área superficial–volumen extremadamente altas, la mejora teórica asociada al incremento del área disponible puede verse parcialmente limitada por efectos macroscópicos relacionados con la manufactura, uniformidad geométrica y accesibilidad real del flujo gaseoso dentro de la estructura monolítica.

Por el contrario, el diseño 4 presentó canales geométricamente más uniformes y paredes estructuralmente más robustas, favoreciendo una distribución más homogénea del flujo y una mejor conservación de la fracción de vacío diseñada. Esto habría permitido una utilización más efectiva de la superficie adsorbente disponible, traduciéndose en mayores capacidades experimentales de captura de  $\text{CO}_2$ . En conjunto, los resultados sugieren la existencia de una morfología óptima donde el aumento de la relación  $S/V$  debe equilibrarse con la estabilidad geométrica y la accesibilidad efectiva del flujo gaseoso hacia la superficie adsorbente.

La Tabla 6.5 consolida los principales parámetros geométricos y resultados experimentales obtenidos para los seis diseños monolíticos evaluados. Se observa una tendencia general de incremento en la capacidad de adsorción al aumentar la relación área superficial–volumen ( $S/V$ ), aunque el diseño 6 no superó el desempeño del diseño 4 pese a presentar el mayor valor teórico de  $S/V$ . Este resultado sugiere que la capacidad de captura no depende únicamente del área geométrica disponible, sino también de factores asociados a la manufactura, uniformidad geométrica y accesibilidad efectiva del flujo gaseoso dentro de la estructura monolítica.

Tabla 6.5: Resumen comparativo de los diseños monolíticos evaluados y del carbón activado granular.

| Parámetro                                        | D1     | D2     | D3     | D4     | D5     | D6     | Granular |
|--------------------------------------------------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|----------|
| Espesor de pared (mm)                            | 7      | 7      | 5      | 4      | 3      | 3      | –        |
| Tamaño de canal (mm)                             | 7      | 5      | 5      | 4      | 5      | 3      | –        |
| Relación $S/V$ (m <sup>2</sup> /m <sup>3</sup> ) | 143    | 200    | 240    | 250    | 312.5  | 333.3  | –        |
| Área efectiva de contacto (m <sup>2</sup> )      | 0.0358 | 0.0438 | 0.0532 | 0.0603 | 0.0637 | 0.0721 | –        |
| $q_m$ (mg CO <sub>2</sub> /kg CA)                | 54.13  | 69.37  | 122.01 | 192.16 | 106.35 | 180.87 | 50.80    |
| $q_A$ (mg CO <sub>2</sub> /m <sup>2</sup> )      | 103.69 | 129.71 | 193.81 | 204.69 | 96.79  | 184.83 | 56.44    |
| Eficiencia de captura $\eta$ (%)                 | 18     | 17     | 23     | 62     | 54     | 58     | 9        |

## 6.5 Influencia de la Temperatura y Humedad

Durante el desarrollo experimental, las pruebas de adsorción fueron realizadas bajo condiciones ambientales no completamente controladas, por lo que existieron variaciones moderadas de temperatura y humedad relativa entre distintos ensayos y duplicados experimentales. Estas variaciones son relevantes debido a que tanto la temperatura como la presencia de vapor de agua pueden modificar el equilibrio de adsorción y las resistencias de transferencia de masa en sistemas de captura de CO<sub>2</sub> mediante carbón activado.

En el primer diseño experimental, las temperaturas promedio registradas fluctuaron entre 17 °C y 21 °C, mientras que la humedad relativa promedio se mantuvo entre 19 y 34%. Bajo estas condiciones, los resultados mostraron que las diferencias de capacidad de adsorción entre diseños fueron significativamente mayores que las variaciones atribuibles únicamente a temperatura o humedad. Por ejemplo, el diseño 3 presentó capacidades de adsorción superiores al diseño 2 aun cuando ambos fueron evaluados bajo condiciones ambientales similares, lo que indica que el efecto geométrico predominó sobre las fluctuaciones ambientales. En el segundo diseño experimental también se observaron variaciones moderadas de temperatura y humedad relativa, especialmente en los ensayos de réplica y calibración. Las temperaturas registradas oscilaron aproximadamente entre 22 °C y 27 °C, mientras que la humedad relativa presentó un rango más amplio, entre aproximadamente 13 y 39%. A pesar de ello, el diseño 4 continuó mostrando el mejor desempeño global en términos de capacidad de captura y eficiencia de remoción, incluso frente a configuraciones con mayor relación superficie–volumen teórica. Esto refuerza la hipótesis de que la accesibilidad difusiva y la geometría interna del pellet ejercen un efecto dominante respecto de las variaciones

ambientales moderadas observadas durante el estudio.

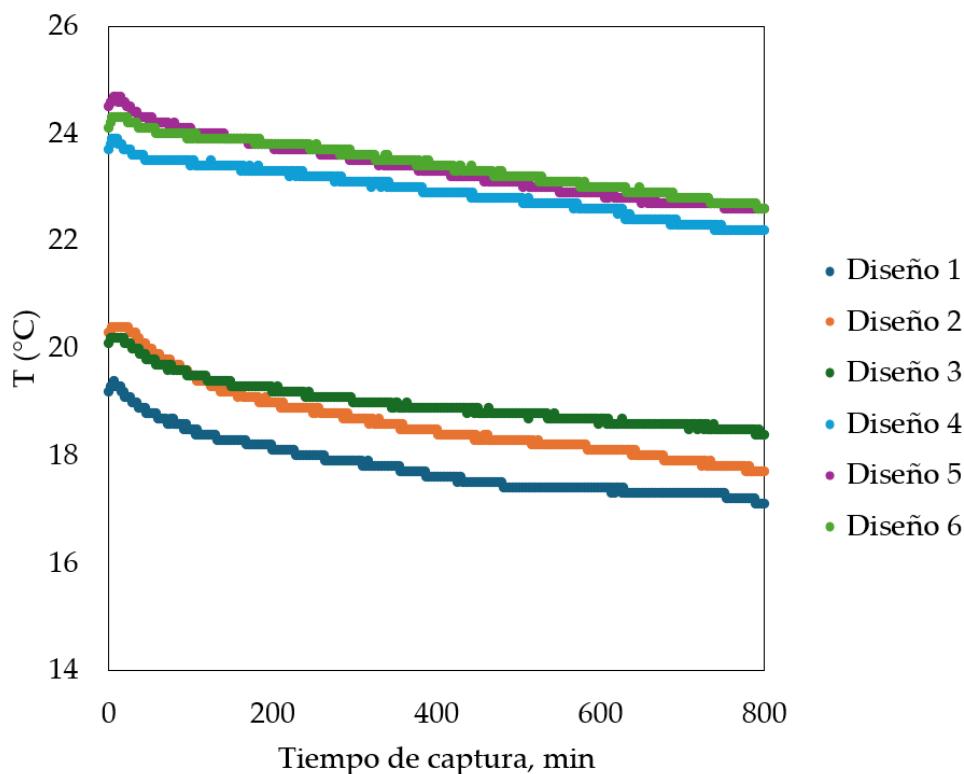


Figura 6.11: Evolución de la temperatura durante la adsorción para cada diseño

No obstante, algunos duplicados experimentales evidenciaron diferencias apreciables en el tiempo de ruptura y capacidad de adsorción. En particular, el duplicado del diseño 3 mostró un incremento de captura respecto al ensayo original bajo una humedad relativa ligeramente menor. Este comportamiento es consistente con la posible reducción de competencia por sitios adsorbentes entre  $\text{CO}_2$  y vapor de agua. De manera similar, en ciertos ensayos realizados a temperaturas levemente superiores se observó una tendencia a disminuciones moderadas en la capacidad de captura, coherente con la naturaleza exotérmica del proceso de adsorción física.

Adicionalmente, durante algunos ensayos se observó una disminución progresiva de la humedad relativa al interior del sistema batch hasta alcanzar una asíntota aproximadamente estable. Este comportamiento podría estar asociado a la adsorción parcial de vapor de agua por parte del carbón activado durante las primeras etapas del experimento, reduciendo gradualmente la humedad disponible en el volumen de aire confinado. Debido a que el  $\text{CO}_2$  y el  $\text{H}_2\text{O}$  pueden competir por ciertos sitios activos del adsorbente, especialmente en materiales microporosos, esta disminución de humedad podría favorecer localmente la captura de  $\text{CO}_2$  en etapas posteriores del ensayo. Sin embargo, este efecto no se observó con igual intensidad en todos los diseños, particularmente en los diseños 4 y 6,

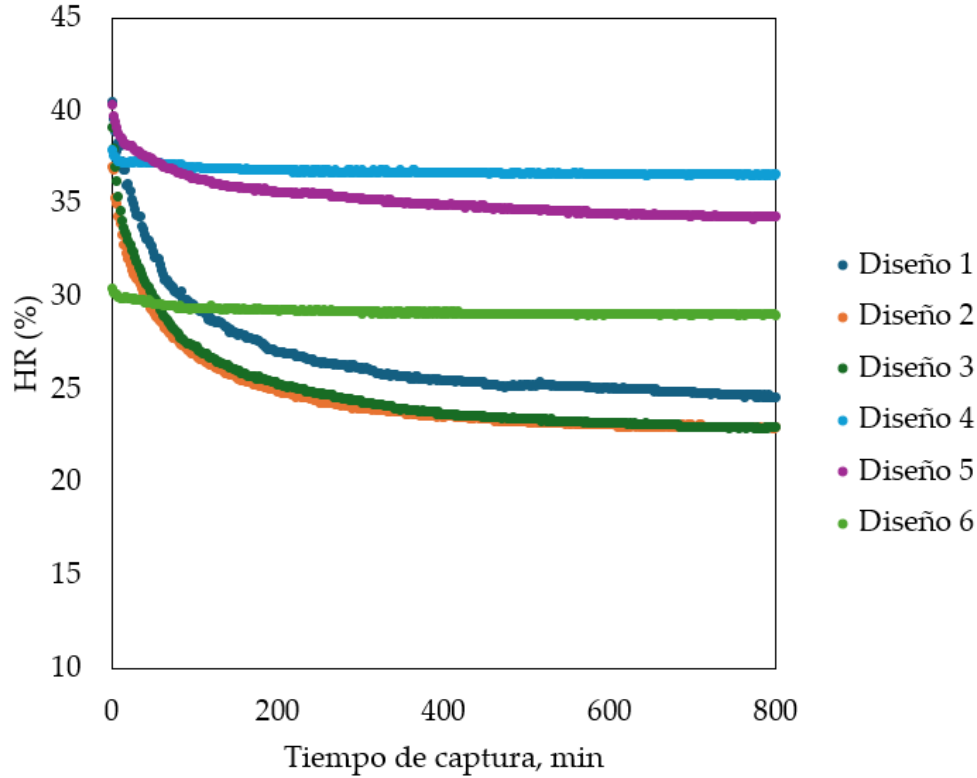


Figura 6.12: Evolución de la humedad relativa durante la adsorción para cada diseño.

donde la humedad permaneció relativamente estable durante gran parte del experimento, sugiriendo que la interacción entre humedad y captura de  $\text{CO}_2$  también podría verse influenciada por la geometría interna y la accesibilidad efectiva del adsorbente. En conjunto, los resultados indican que las variaciones moderadas de temperatura y humedad relativa introducen efectos secundarios sobre el equilibrio de adsorción y la competencia por sitios activos; no obstante, las tendencias globales observadas entre diseños se mantuvieron consistentes bajo distintas condiciones ambientales, lo que sugiere que la morfología geométrica del pellet monolítico ejerció una influencia predominante sobre el desempeño global de captura de  $\text{CO}_2$ .

## 6.6 Análisis Técnico Económico

El análisis técnico-económico permite evaluar la viabilidad del sistema de captura directa de aire (DAC) diseñado, considerando la inversión inicial, los costos de operación anuales y el costo nivelado de captura (LCOC). El flujo general seguido incluye: (i) definición del objetivo de captura; (ii) conversión de los resultados experimentales a capacidad de captura por pellet; (iii) dimensionamiento

del número total de pellets y del volumen de lecho necesario; (iv) estimación del costo de capital (CAPEX); (v) estimación de los costos de operación (OPEX); y (vi) cálculo del LCOC para un horizonte de 20 años.

### 6.6.1 Diagrama de procesos

A continuación en la Figura 6.15 se presentan las etapas de un proceso de captura directa de aire (DAC) operado mediante un ciclo TVSA (Temperature–Vacuum Swing Adsorption), utilizado como base las columnas con el lecho adsorbente que en su interior se encuentran los pellets monolíticos.

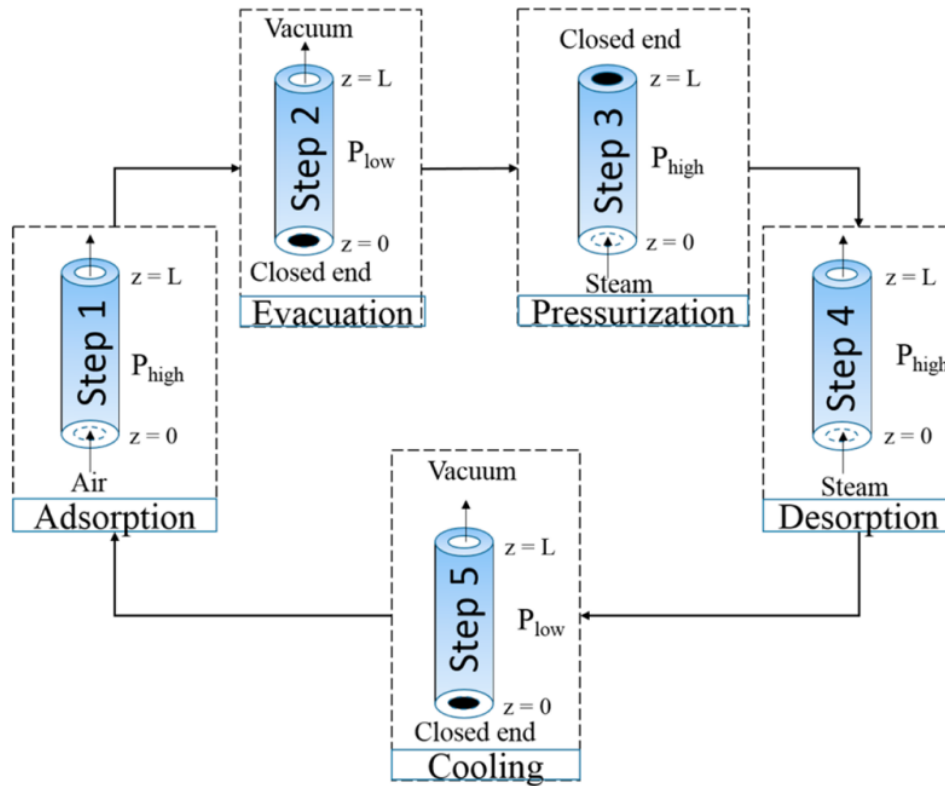


Figura 6.13: Pasos del proceso TVSA en captura DAC [79].

El proceso TVSA se desarrolla a través de una secuencia de etapas destinadas a maximizar la captura y liberación de  $\text{CO}_2$ . Durante la etapa de adsorción, el aire ambiente atraviesa el lecho empacado, donde el adsorbente retiene selectivamente el  $\text{CO}_2$  y se libera aire empobrecido en dicho gas. Seguidamente, se reduce la presión del sistema para evacuar el  $\text{N}_2$  residual y preparar el lecho para la regeneración. La desorción se efectúa mediante un calentamiento simultáneo bajo

condiciones de vacío, lo que permite alcanzar la temperatura de regeneración y favorecer la liberación eficiente del  $\text{CO}_2$  adsorbido. Tras la desorción, el lecho es enfriado mediante un intercambiador de calor para mantener la estabilidad térmica del material y prevenir la degradación (por ejemplo de aminas), recuperando condiciones adecuadas para la siguiente adsorción. Finalmente, el sistema se presuriza de forma controlada hasta la presión atmosférica mediante la reintroducción gradual de aire, momento en el cual comienza un nuevo ciclo operativo.

El proceso TVSA fue seleccionado debido a que constituye una de las configuraciones más utilizadas industrialmente en sistemas DAC basados en adsorbentes sólidos. Aunque requiere un mayor consumo energético en comparación con procesos VSA convencionales, la combinación de vacío y temperatura permite una regeneración más efectiva del adsorbente bajo las bajas presiones parciales de  $\text{CO}_2$  presentes en el aire atmosférico. Esto incrementa la capacidad de trabajo cíclica del material y mejora la eficiencia global de captura, razones por las cuales tecnologías DAC comerciales utilizan predominantemente este tipo de configuración operacional [15].

### 6.6.2 Capacidad de captura

El objetivo de captura del sistema se fijó en 600 ton  $\text{CO}_2$ /año, valor que se fundamenta directamente en la escala de operación de la primera planta piloto de Captura Directa de Aire (DAC) implementada en Chile por la empresa HIF Global en la planta Haru Oni, con el apoyo de Corfo. Dicho proyecto, actualmente en etapa de validación tecnológica, tiene como meta capturar hasta 600 toneladas anuales de  $\text{CO}_2$  directamente desde la atmósfera para su posterior utilización en la producción de e-combustibles carbono-neutrales, como e-metanol y e-gasolina (ver Figura 6.14) [80].

La adopción de esta misma capacidad anual en el presente estudio permite situar el análisis en un contexto tecnológico e industrial realista, alineado con iniciativas actualmente en desarrollo en el país y con potencial de escalamiento global. De este modo, los resultados obtenidos no solo permiten evaluar el desempeño relativo de distintas geometrías de pellets monolíticos a escala de laboratorio, sino también proyectar su aplicación en sistemas DAC de carácter piloto o pre-industrial.



Figura 6.14: Instalación de un sistema de Captura Directa de Aire (DAC) en la planta Haru Oni de HIF [80].

### 6.6.3 Dimensionamiento

A partir de la capacidad de captura objetivo, se estimó el número total de pellets monolíticos requeridos, el volumen efectivo del lecho adsorbente y las dimensiones modulares necesarias para alcanzar dicha tasa anual de remoción de  $\text{CO}_2$ . En la Figura 6.15 se observa un diagrama de procesos TVSA de 4 columnas que resume las principales etapas del ciclo; adsorción, calentamiento, desorción al vacío y enfriamiento junto con los equipos involucrados, permitiendo visualizar el flujo operacional. Este enfoque modular es consistente con la filosofía de diseño de tecnologías DAC, donde la replicabilidad de unidades idénticas permite aumentar la capacidad total sin alterar significativamente las condiciones de operación ni la eficiencia del proceso.

La altura de cada columna se fijó en 11 m, valor compatible con diseños industriales de contactores de lecho fijo, lo que permitió determinar un área transversal de  $1,71 \text{ m}^2$  por columna. A partir de esta área, se calculó un diámetro interno de 1,47 m (147,5 cm), dimensión considerada razonable desde el punto de vista constructivo, estructural y operativo para una planta DAC de

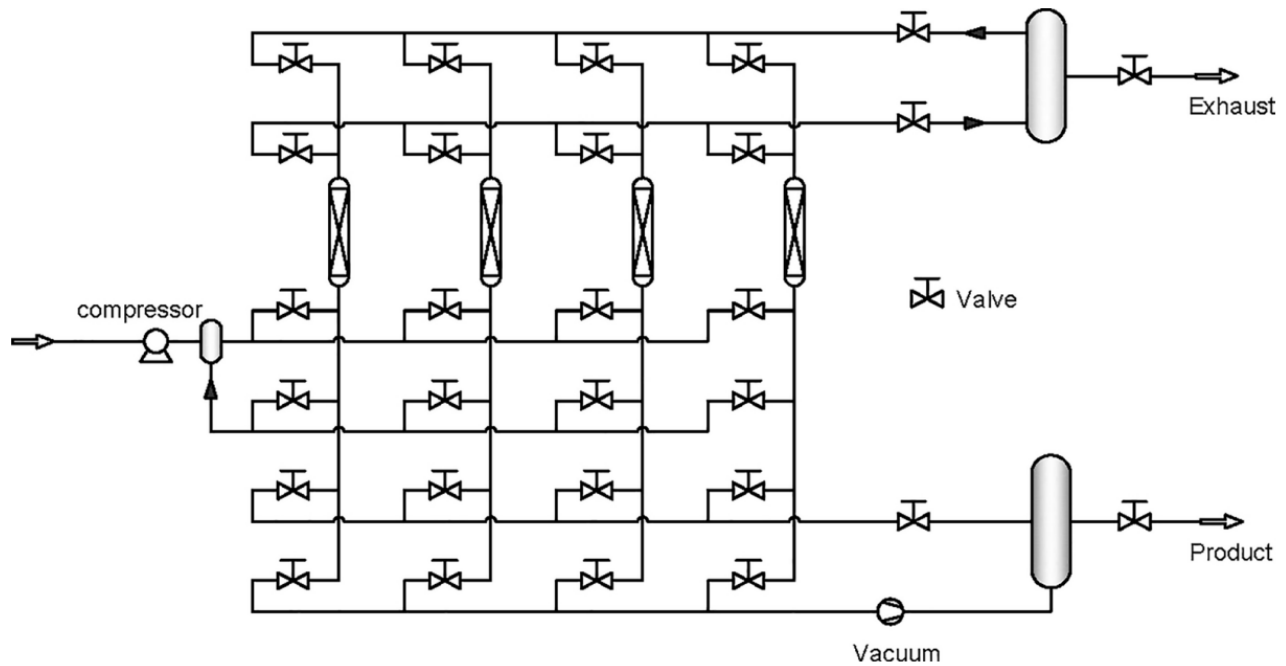


Figura 6.15: Diagrama de procesos TVSA esquemático para el proceso de captura DAC de 600 ton CO<sub>2</sub>/año [36].

escala piloto-industrial. En la Tabla 6.6 se encuentran las especificaciones técnicas de cada columna de acuerdo a la capacidad de captura objetivo.

Tabla 6.6: Parámetros de dimensionamiento del sistema DAC para una capacidad de captura de 600 ton CO<sub>2</sub>/año.

| Parámetro                         | Valor | Unidad            |
|-----------------------------------|-------|-------------------|
| Densidad aparente del lecho       | 400   | kg/m <sup>3</sup> |
| Volumen total de lecho adsorbente | 75,13 | m <sup>3</sup>    |
| Número de columnas modulares      | 4     | —                 |
| Volumen de lecho por columna      | 18,78 | m <sup>3</sup>    |
| Altura de columna                 | 11    | m                 |
| Área transversal de columna       | 1,71  | m <sup>2</sup>    |
| Diámetro interno de columna       | 147,5 | cm                |

Este dimensionamiento preliminar establece una base realista para la implementación del sistema de captura propuesto y permite vincular directamente los resultados experimentales obtenidos a nivel de pellet con un diseño de proceso escalable y técnicamente viable.

### 6.6.4 Escalamiento

El escalamiento de los distintos diseños monolíticos se realizó a partir de la capacidad de captura normalizada por área efectiva de contacto ( $q_A$ ), expresada en  $\text{mgCO}_2/\text{m}^2$ . Este parámetro fue seleccionado debido a que permite representar de manera más directa la eficiencia real de utilización de la superficie accesible del adsorbente, independiente de la masa total utilizada en cada ensayo. Además, considerando que los pellets monolíticos presentan diferencias geométricas importantes en número de canales, espesor de pared y relación superficie/volumen, el uso de  $q_A$  permite comparar el desempeño intrínseco de cada morfología bajo una misma base de transferencia de masa. La Tabla 6.7 resume los valores experimentales de capacidad de captura por área obtenidos para cada diseño evaluado.

Tabla 6.7: Capacidad de captura normalizada por área efectiva para cada diseño evaluado.

| <b>Diseño</b> | <b><math>q_A</math> (<math>\text{mgCO}_2/\text{m}^2</math>)</b> |
|---------------|-----------------------------------------------------------------|
| Granular      | 56.45                                                           |
| Diseño 1      | 132.56                                                          |
| Diseño 2      | 138.85                                                          |
| Diseño 3      | 238.72                                                          |
| Diseño 4      | 268.37                                                          |
| Diseño 5      | 160.45                                                          |
| Diseño 6      | 195.08                                                          |

### 6.6.5 CAPEX

El cálculo del CAPEX considera los costos directos (equipos, instalación, tuberías, instrumentación, obras civiles y servicios auxiliares) y los costos indirectos (ingeniería, construcción, gastos legales, margen del contratista y contingencia). El CAPEX fue estimado utilizando el método de factores de Lang, basado en el costo de equipos entregados (E) como variable base. Los distintos ítems de inversión se determinaron como fracciones porcentuales de E, empleando factores típicos para plantas de procesamiento de sólidos reportados en la literatura [81]. Este enfoque es ampliamente utilizado en etapas tempranas de diseño, permitiendo obtener estimaciones consistentes del costo de capital a partir de información limitada de ingeniería.

La Tabla 6.8 presenta el desglose completo de los costos de capital requeridos para una planta piloto de 600 ton/año, mientras que la Figura 6.16 muestra la distribución porcentual del CAPEX por tipo de equipo.

Tabla 6.8: Desglose del CAPEX total para una planta DAC de 600 ton CO<sub>2</sub>/año con carbón activado granular, basado en factores porcentuales del costo de equipos entregados (E) [81].

| Concepto                           | Factor (% de E)      | Costo (USD)         |
|------------------------------------|----------------------|---------------------|
| Equipos principales (E)            | 100%                 | \$5.594.415         |
| Instalación de equipos             | 39%                  | \$2.237.766         |
| Instrumentación y control          | 12%                  | \$671.330           |
| Piping                             | 25%                  | \$1.398.604         |
| Sistemas eléctricos                | 6%                   | \$335.665           |
| Edificios y servicios              | 8%                   | \$447.553           |
| Mejoras en el sitio                | 4%                   | \$223.777           |
| Servicios auxiliares               | 5%                   | \$279.721           |
| <b>Total costos directos (D)</b>   | <b>200% E aprox.</b> | <b>\$11.188.829</b> |
| Ingeniería y supervisión           | 30%                  | \$1.678.324         |
| Gastos de construcción             | 40%                  | \$2.237.766         |
| Gastos legales                     | 5%                   | \$279.721           |
| Margen del contratista             | 24%                  | \$1.342.660         |
| Contingencia                       | 40%                  | \$2.237.766         |
| <b>Total costos indirectos (I)</b> | <b>139% E aprox.</b> | <b>\$7.776.236</b>  |
| <b>Inversión total (D + I)</b>     |                      | <b>\$18.965.066</b> |
| Capital de trabajo                 | 15% de (D+I)         | \$2.844.760         |
| <b>CAPEX total</b>                 |                      | <b>\$21.809.826</b> |

Se incluye un gráfico del CAPEX total de acuerdo a un proyecto DAC total utilizando pellets monolíticos de carbón activado (Figura 6.17). Estos valores provienen de la extrapolación de la capacidad de captura por área ( $q_A$ ) hacia el dimensionamiento a escala industrial.

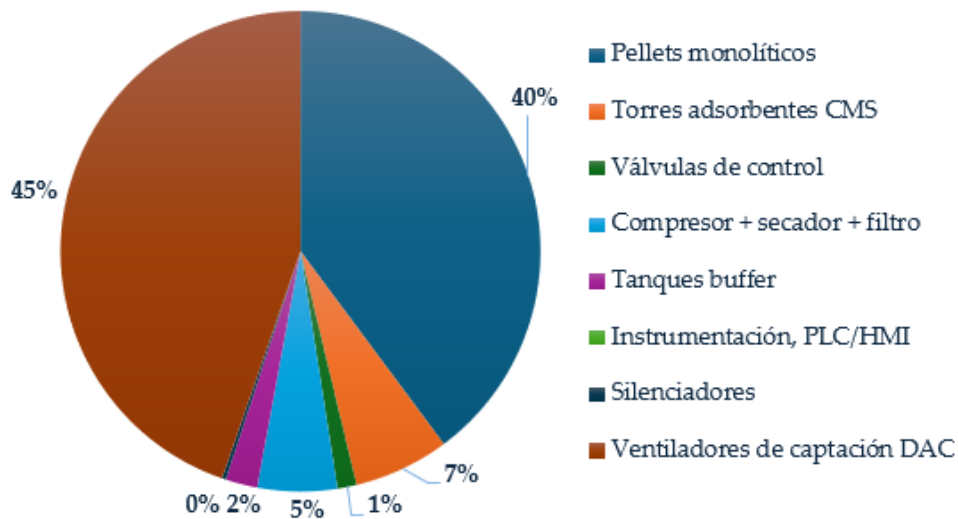


Figura 6.16: Distribución del CAPEX por tipo de equipo.

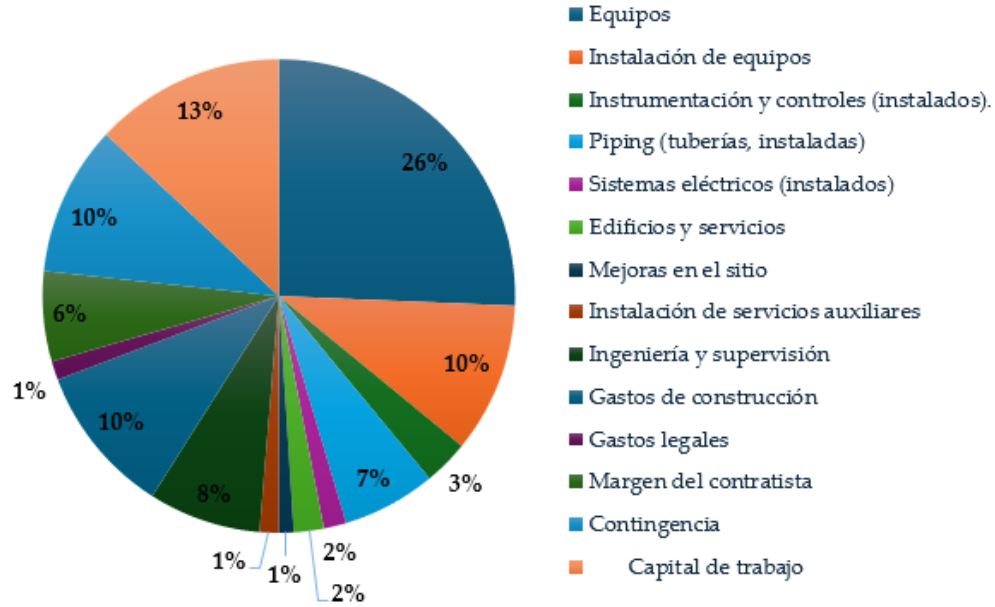


Figura 6.17: Distribución del CAPEX total.

### 6.6.6 OPEX

El OPEX anual fue estimado mediante un enfoque de factores típicos de operación, expresados como porcentaje del CAPEX, complementado con cálculos simplificados para el consumo energético. El consumo eléctrico asociado al sistema de soplado (blower) se estimó a partir de una potencia nominal de operación de 100 kW y un tiempo de funcionamiento anual de 8760 h, correspondiente a operación continua. De este modo, el consumo energético anual se calculó como:

$$E_{\text{anual}} = P \cdot t = 100 \text{ kW} \times 8760 \text{ h} = 876.000 \text{ kWh/año}$$

El costo asociado se obtuvo considerando un precio unitario de la energía eléctrica, estimado en base a valores de referencia industriales [81].

Por su parte, el consumo térmico para la regeneración del adsorbente se estimó utilizando un requerimiento energético específico de 800 kWh/tCO<sub>2</sub>, valor representativo de procesos de captura directa de aire reportados en la literatura. Considerando una capacidad de captura de 600 ton

CO<sub>2</sub>/año, se obtuvo un consumo anual de:

$$E_{\text{regen}} = 800 \text{ kWh/tCO}_2 \times 600 \text{ t/año} = 480.000 \text{ kWh/año}$$

Los costos de mantenimiento se estimaron como un 3% del CAPEX total, dentro del rango típico de 2–5% reportado para plantas de proceso. De manera similar, otros costos operacionales como seguros, administración y repuestos se calcularon como fracciones del CAPEX, mientras que el costo de reemplazo del adsorbente se consideró como un 10% anual del inventario total de carbón activado.

En conjunto, el OPEX total se encuentra dentro del rango típico de 8–15% del CAPEX anual, lo que valida la consistencia de las estimaciones realizadas para el presente estudio. La Tabla 6.9 resume los valores utilizados y el OPEX total calculado para la planta DAC.

Tabla 6.9: Desglose del OPEX anual estimado para la planta DAC, incluyendo criterio de cálculo para cada componente.

| <b>Componente</b>              | <b>Criterio de estimación</b>           | <b>USD/año</b>     |
|--------------------------------|-----------------------------------------|--------------------|
| Energía eléctrica (blower)     | 100 kW, operación continua (8760 h/año) | \$1.308.590        |
| Energía térmica (regeneración) | 800 kWh/tCO <sub>2</sub>                | \$222.741          |
| Mantenimiento                  | 3% del CAPEX                            | \$654.295          |
| Personal                       | 4 operarios                             | \$120.000          |
| Seguro/administración          | 1% del CAPEX                            | \$218.098          |
| Repuestos                      | 2% del CAPEX                            | \$436.197          |
| Consumibles                    | Estimación fija                         | \$5.000            |
| Administración general         | Estimación fija                         | \$20.000           |
| Reemplazo de sorbente          | 10% del inventario anual                | \$64.450           |
| <b>OPEX total</b>              |                                         | <b>\$2.984.921</b> |

La Figura 6.18 muestra la distribución porcentual del OPEX anual.

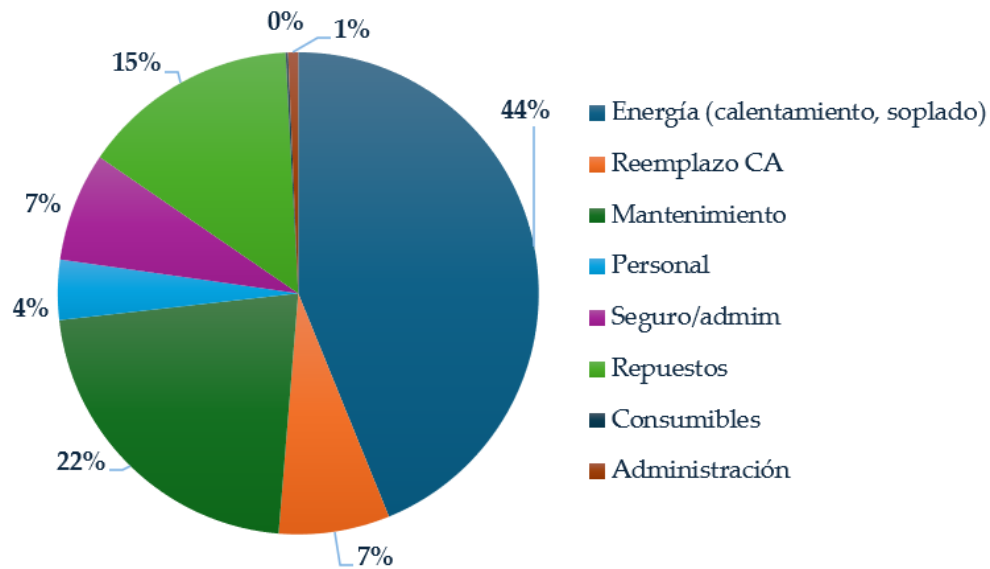


Figura 6.18: Distribución del OPEX.

### 6.6.7 Costo nivelado de captura (LCOC)

El costo nivelado de captura (LCOC) se calculó considerando el CAPEX, el OPEX anual y una vida útil de 20 años. La selección de este horizonte de evaluación responde a valores típicos reportados para plantas de procesos químicos e instalaciones industriales de captura de CO<sub>2</sub>, donde los equipos principales presentan vidas útiles del orden de dos décadas [15].

Para incorporar el efecto temporal del dinero y representar de manera más realista la viabilidad económica del sistema, se utilizó una tasa de descuento anual de 9%. Este valor se encuentra dentro del rango comúnmente utilizado en evaluaciones tecnoeconómicas de tecnologías de captura de carbono y proyectos industriales energéticos, representando un escenario intermedio asociado al costo de capital, riesgo tecnológico y retorno esperado de inversión en sistemas emergentes DAC. La incorporación de esta tasa permite comparar los diseños bajo un criterio económico más representativo de condiciones reales de implementación industrial [81].

Para reflejar adecuadamente los costos anuales, se empleó el CAPEX anualizado, calculado mediante el *Capital Recovery Factor* (CRF), definido como:

$$\text{CAPEX anualizado} = \text{CAPEX total} \times \text{CRF} \quad (6.3)$$

El CRF permite distribuir el costo de inversión a lo largo de la vida útil de la planta mediante pagos anuales equivalentes y se calcula según:

$$\text{CRF} = \frac{r(1+r)^N}{(1+r)^N - 1} \quad (6.4)$$

Donde  $r$  corresponde a la tasa de descuento anual y  $N$  al horizonte de operación del proyecto.

En este estudio se consideró una vida útil de  $N = 20$  años y una tasa de descuento de  $r = 0.09$ . Bajo estas condiciones, el costo nivelado de captura (LCOC) se determinó mediante:

$$\text{LCOC} = \frac{(\text{CAPEX} \times \text{CRF}) + \text{OPEX anual}}{\text{Captura anual de CO}_2} \quad (6.5)$$

La Figura 6.19 muestra los valores comparativos de CAPEX anualizado y OPEX anual para cada diseño evaluado y la Figura 6.20 presenta una comparación conjunta del LCOC para todos los diseños evaluados.

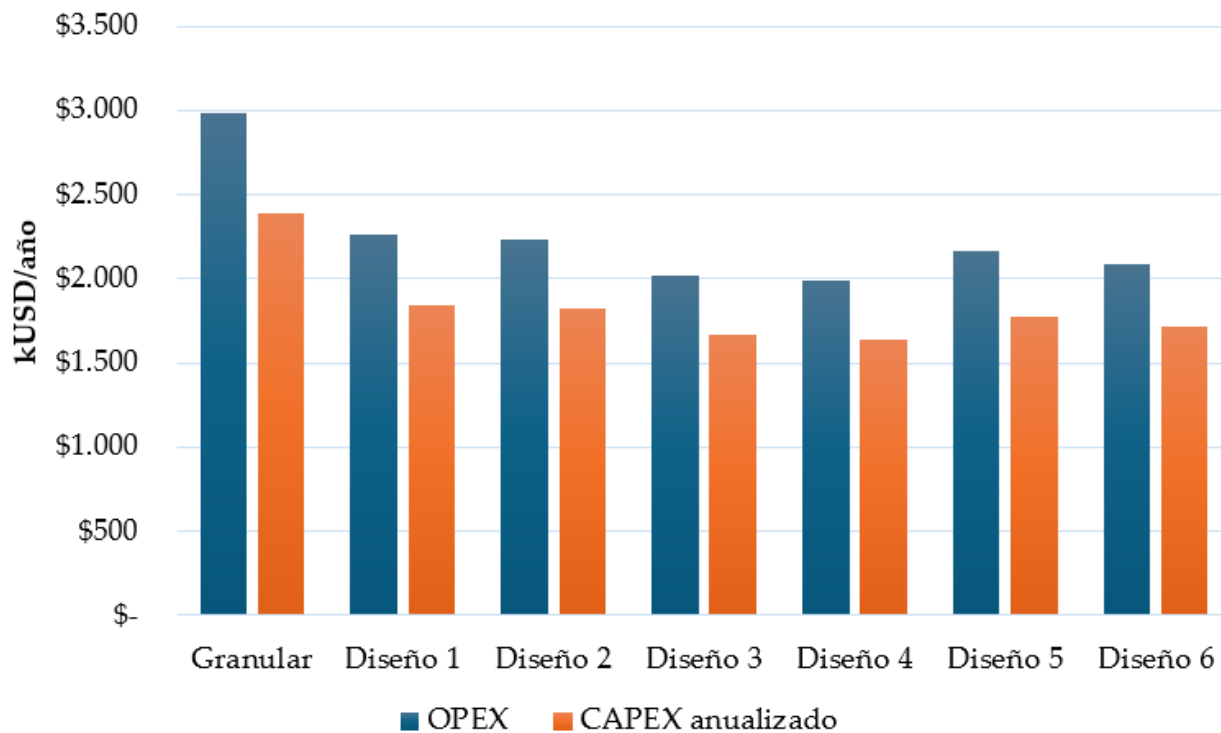


Figura 6.19: CAPEX anualizado y OPEX anual para cada diseño de pellet monolítico.

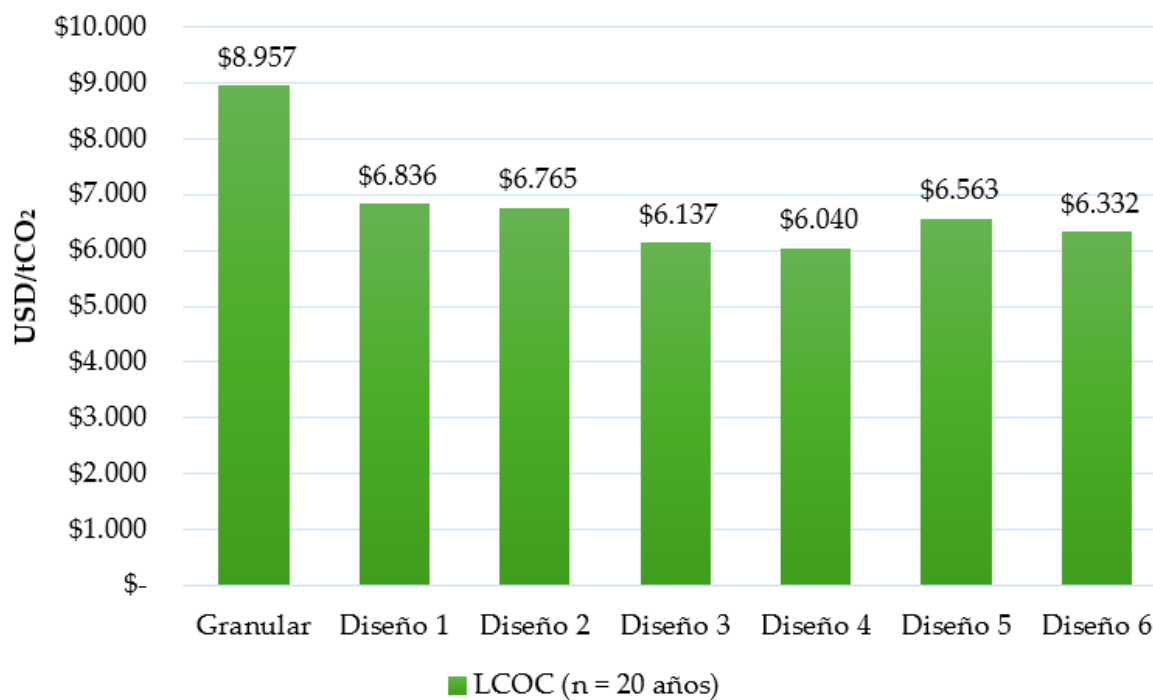


Figura 6.20: Comparación de LCOC para todos los diseños evaluados.

Los resultados obtenidos para el Costo Nivelado de Captura (LCOC) muestran diferencias significativas entre las distintas geometrías evaluadas y evidencian claramente la influencia de la morfología del contactor sobre el desempeño económico global del proceso DAC. Entre todas las configuraciones, incluidos los pellets monolíticos y el control granular, el diseño 4 se posiciona como la alternativa más competitiva tanto técnica como económicamente. Este diseño presenta simultáneamente el menor CAPEX, el menor OPEX y el valor más bajo de LCOC, lo que en conjunto establece una ventaja económica considerable frente al resto de las configuraciones.

En comparación con el adsorbente granular, el diseño 4 presenta una reducción acumulada de costos durante su vida útil equivalente a aproximadamente USD 6,86 millones, derivada principalmente de su menor consumo energético y de su mayor eficiencia en el uso del área interna efectiva. La geometría optimizada del canal (4 mm) y el espesor de pared (4 mm) permite un compromiso favorable entre área de contacto, resistencia difusiva y caída de presión, lo que se traduce en menores requerimientos de energía para el soplado y una capacidad de captura superior por unidad de área. Esta combinación reduce los costos operacionales año a año y disminuye la necesidad de sobredimensionar equipos, lo cual también recorta los costos de inversión.

El diseño 4 resulta ser un punto óptimo entre estas dos tendencias contrapuestas. Su nivel de rendimiento no solo permite minimizar la cantidad total de pellets necesarios, sino que también reduce el número de columnas modulares, equipos auxiliares y energía térmica requerida para la regeneración. Todo esto se refleja directamente en un LCOC de USD 6.040 por tonelada capturada, el más bajo entre todas las alternativas evaluadas y marcadamente inferior al valor obtenido para el sistema granular (USD 8.957/tCO<sub>2</sub>).

### 6.6.8 Análisis de sensibilidad económica

Las estimaciones de CAPEX, OPEX y costo nivelado de captura (LCOC) presentadas en este estudio corresponden a un escenario base construido a partir de parámetros de diseño, costos energéticos y factores económicos reportados en la literatura [81]. Sin embargo, debido a la incertidumbre inherente asociada al escalamiento de tecnologías DAC emergentes, resulta relevante analizar de forma conceptual la sensibilidad de los resultados frente a variaciones en las variables económicas más influyentes.

Entre los parámetros evaluados, el costo de la energía eléctrica representa uno de los factores con mayor impacto potencial sobre el OPEX. Esto se debe a que los sistemas DAC requieren

el procesamiento de grandes volúmenes de aire mediante ventiladores o sopladores, además del consumo energético asociado a la regeneración del adsorbente. Un aumento en las tarifas eléctricas incrementaría directamente los costos operacionales anuales y, por consiguiente, el LCOC. De manera similar, una disminución del costo de la energía renovable podría mejorar significativamente la competitividad económica de la tecnología. Otra variable relevante corresponde a la capacidad de captura del adsorbente. Dado que el dimensionamiento de la planta se realizó a partir de los valores experimentales de captura obtenidos para cada diseño, cualquier mejora en la capacidad adsorptiva efectiva permitiría reducir la cantidad de adsorbente requerida, disminuir el tamaño de los equipos y reducir tanto el CAPEX como el consumo energético asociado. Por esta razón, la capacidad de captura constituye una de las variables técnicas con mayor influencia sobre el desempeño económico global del sistema.

Asimismo, la vida útil del adsorbente afecta directamente los costos de reposición considerados dentro del OPEX. Una degradación acelerada del carbón activado o una pérdida progresiva de capacidad de adsorción aumentarían la frecuencia de reemplazo del material, incrementando los costos operacionales. En contraste, adsorbentes con mayor estabilidad cíclica permitirían reducir este componente del OPEX y mejorar el desempeño económico de largo plazo. La tasa de descuento utilizada para el cálculo del factor de recuperación de capital también influye sobre el LCOC. Tasas de descuento más elevadas aumentan el costo anualizado del CAPEX, mientras que tasas menores favorecen proyectos intensivos en inversión inicial, como las tecnologías DAC. Debido a que una fracción importante del costo total corresponde a inversión de capital, el LCOC presenta una sensibilidad significativa frente a esta variable financiera.

A pesar de estas incertidumbres, los resultados obtenidos sugieren que las diferencias relativas observadas entre los distintos diseños monolíticos se mantendrían bajo escenarios razonables de variación de costos. En particular, el diseño 4 continuaría presentando ventajas económicas frente al resto de las configuraciones evaluadas debido a su combinación favorable de capacidad de captura, utilización efectiva del área de contacto y menores requerimientos de dimensionamiento. Por lo tanto, aunque los valores absolutos de CAPEX, OPEX y LCOC podrían variar bajo distintos escenarios económicos, la tendencia general observada en el presente estudio se considera robusta desde una perspectiva comparativa.

## 6.7 Caracterización Textural

Los resultados obtenidos para las muestras de carbón activado presentaron particularidades asociadas a su elevada microporosidad. En particular, las isotermas experimentales condujeron a valores negativos de la constante BET ( $C$ ), lo que invalida el significado físico del área superficial calculada mediante el modelo BET clásico. En la Tabla 6.10 se presentan los principales parámetros texturales obtenidos a partir del análisis de adsorción–desorción de  $N_2$ , tal como fueron reportados por el equipo.

Tabla 6.10: Parámetros texturales reportados a partir de los análisis de adsorción–desorción de  $N_2$ .

| Muestra                 | Área BET ( $m^2/g$ ) | Constante $C$ | Área microporos ( $m^2/g$ ) | Área externa ( $m^2/g$ ) |
|-------------------------|----------------------|---------------|-----------------------------|--------------------------|
| Polvo                   | 674.1                | −37.06        | 558.006                     | 116.093                  |
| Diseño 4<br>(fragmento) | 416.932              | −20.84        | 350.578                     | 66.354                   |
| Diseño 4<br>(molido)    | 446.1                | −36.67        | 379.077                     | 67.004                   |
| Diseño 5<br>(fragmento) | 387.1                | −22.14        | 326.306                     | 60.814                   |
| Diseño 6<br>(fragmento) | 392.9                | −22.90        | 326.442                     | 66.448                   |

Desde un punto de vista teórico, la constante  $C$  en la ecuación BET está relacionada con la energía de adsorción de la primera capa en comparación con la energía de licuefacción del adsorbato, y se expresa como:

$$C = \exp\left(\frac{E_1 - E_L}{RT}\right)$$

Donde  $E_1$  corresponde a la energía de adsorción de la primera capa y  $E_L$  a la energía de condensación del adsorbato. Por definición,  $C$  debe ser siempre positivo, ya que representa una relación exponencial entre energías. Valores altos de  $C$  indican una fuerte interacción adsorbente–adsorbato, mientras que valores bajos (pero positivos) reflejan interacciones más débiles [17].

La obtención de valores negativos de  $C$  no tiene interpretación física directa y es indicativa de que los supuestos del modelo BET no se cumplen en el sistema analizado. En particular, el modelo BET asume la formación de capas sucesivas de adsorbato sobre una superficie homogénea, lo cual

no es representativo en materiales altamente microporosos, donde el mecanismo dominante es el llenado de microporos más que la formación de capas [21].

En estos materiales, la adsorción ocurre de manera significativa a muy bajas presiones relativas ( $P/P_0 < 0.01$ ), lo que dificulta la obtención de una región lineal adecuada para la aplicación del método BET. Como consecuencia, la regresión lineal utilizada para determinar los parámetros BET puede producir pendientes o interceptos no físicos, resultando en valores negativos de  $C$ . Es importante destacar que un valor negativo de  $C$  no invalida la isoterma experimental en sí, sino únicamente la aplicabilidad del modelo BET para describirla. Es decir, los datos experimentales siguen siendo válidos, pero no pueden ser interpretados correctamente bajo los supuestos de adsorción multicapa del modelo BET [17]. Debido a lo anterior, los valores de área superficial BET obtenidos en este trabajo no son reportados ni utilizados para análisis comparativos, a fin de evitar interpretaciones sin base física confiable. No obstante, el análisis cualitativo de las isothermas, junto con métodos complementarios como el *t-plot*, confirma una contribución predominante de microporos en todas las muestras, en concordancia con la literatura para carbones activados obtenidos por activación física.

Los resultados completos de adsorción-desorción de  $N_2$ , junto con los análisis BET, *t-plot* y distribución de tamaño de poro, se incluyen en los Anexos B, C y D con fines de trazabilidad experimental.

## 6.8 Determinación del pH Carga 0

Con el objetivo de asegurar la reproducibilidad del método de desplazamiento de pH, se realizaron dos corridas experimentales independientes bajo las mismas condiciones operacionales. Los resultados individuales se presentan en la Figura 6.21, mientras que la curva promedio obtenida a partir del duplicado experimental se muestra en la Figura 6.22, incluyendo la desviación estándar asociada.

Tal como se observa en la Figura 6.22, el sistema presenta una región donde el pH final permanece prácticamente constante frente a variaciones del pH inicial, particularmente en el rango de pH inicial comprendido entre 4 y 10. En esta zona, los valores promedio de pH final se sitúan en torno a 8.4, evidenciando una meseta característica del entorno del punto de carga cero.

A partir del promedio de los valores en la región de estabilidad, el pH del punto de carga cero

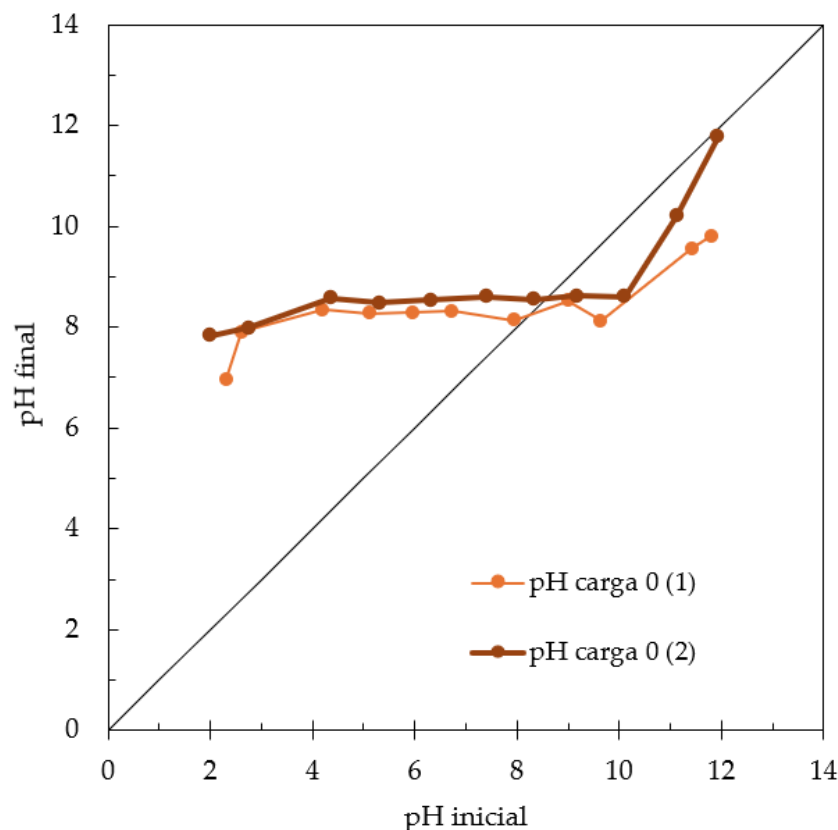


Figura 6.21: Curvas de pH final en función del pH inicial correspondientes a la segunda y tercera corrida experimental para la determinación del punto de carga cero.

del carbón activado de cáscara de coco se estimó en:

$$pH_{pzc} = 8.43 \pm 0.10$$

Donde el error corresponde al error estándar del duplicado experimental.

Este valor indica que el material presenta un carácter superficial moderadamente básico. La concordancia entre ambas corridas experimentales confirma la adecuada reproducibilidad del método y sugiere estabilidad en el comportamiento ácido-base del material bajo las condiciones evaluadas.

En comparación con antecedentes bibliográficos para carbones activados de cáscara de coco activados físicamente mediante vapor de agua, donde se reportan valores de  $pH_{pzc}$  cercanos a 9.0–9.5 [45], el valor obtenido en este estudio ( $8.43 \pm 0.10$ ) resulta ligeramente inferior. Sin embargo, esta diferencia no invalida la naturaleza básica del material, sino que puede atribuirse a variaciones en parámetros de síntesis y postratamiento tales como temperatura y tiempo de activación, contenido

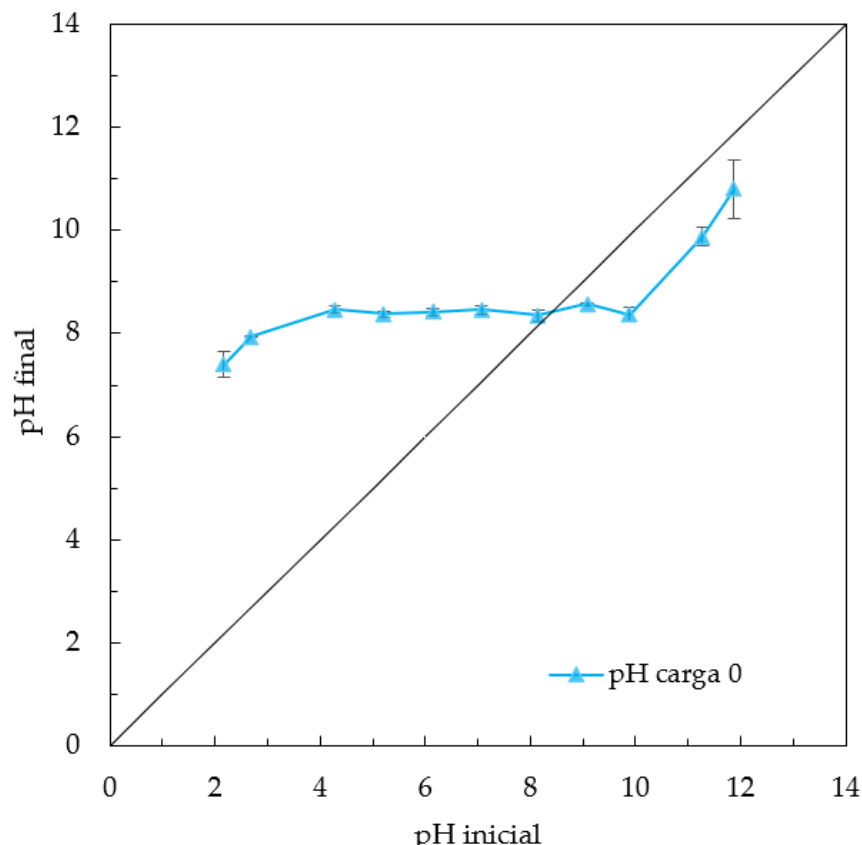


Figura 6.22: Determinación del pH del punto de carga cero a partir del promedio de dos corridas experimentales. Se incluye la recta  $pH_{final} = pH_{inicial}$  como referencia teórica. Las barras de error corresponden a la desviación estándar del duplicado.

de cenizas minerales, grado de oxidación superficial o condiciones de almacenamiento previas al análisis.

Es ampliamente reportado que el  $pH_{pzc}$  de carbones activados puede variar dentro de un rango relativamente amplio dependiendo de la severidad del tratamiento térmico y de la presencia de grupos funcionales oxigenados superficiales. Un leve incremento en la densidad de grupos ácidos superficiales (carboxílicos, lactónicos o fenólicos) puede desplazar el  $pH_{pzc}$  hacia valores ligeramente menores sin modificar sustancialmente el carácter global del material [45, 21].

La dispersión observada, reflejada en las barras de error, puede atribuirse a variaciones inherentes al sistema, tales como el estado de hidratación superficial del carbón activado, la posible readsorción de especies alcalinas durante el almacenamiento y la ausencia de electrolito de fondo en el medio acuoso. El uso de agua destilada tipo II favorece que los grupos funcionales superficiales dominen el equilibrio ácido-base del sistema, amplificando ligeramente las diferencias experimentales sin

afectar la determinación del valor global del  $\text{pH}_{pzc}$ .

En conjunto, los resultados permiten establecer con confianza estadística un valor de  $\text{pH}_{pzc}$  cercano a 8.4 para el carbón activado estudiado. Este valor confirma un carácter superficial básico y resulta coherente con materiales carbonosos activados físicamente que presentan una combinación de sitios básicos tipo pirona, estructuras aromáticas con electrones  $\pi$  deslocalizados y una fracción controlada de grupos oxigenados superficiales.

Desde el punto de vista aplicado, un  $\text{pH}_{pzc}$  en torno a 8.4 sigue siendo favorable para la adsorción de especies con comportamiento ácido como el  $\text{CO}_2$ , donde las interacciones ácido-base de Lewis y la estabilización de especies bicarbonato y carbonato pueden verse termodinámicamente favorecidas en superficies con predominio de sitios básicos. En el caso de los monolitos elaborados a partir de este carbón activado, la conservación de este carácter básico superficial, junto con una estructura macroscópica estable, contribuye a explicar el desempeño observado en procesos de captura de gases ácidos.

## 6.9 Evaluación del carbón activado para aplicación en DAC

A partir de la caracterización física entregada por el proveedor y de los resultados experimentales obtenidos en este trabajo, se puede establecer que el carbón activado utilizado presenta propiedades compatibles con aplicaciones de captura directa de  $\text{CO}_2$  desde aire (DAC), aunque no corresponde a un material específicamente diseñado para este tipo de aplicación. El carbón empleado fue originalmente comercializado para procesos de filtración y purificación de agua, por lo que sus propiedades texturales no se encuentran optimizadas para captura DAC de ultra baja concentración. En general, adsorbentes desarrollados específicamente para DAC suelen presentar áreas superficiales superiores a  $1000 \text{ m}^2/\text{g}$  y una microporosidad altamente desarrollada, particularmente en el rango de ultramicroporos y supermicroporos, los cuales favorecen la adsorción de  $\text{CO}_2$  a bajas presiones parciales. Si bien los análisis BET realizados en este trabajo presentaron constantes  $C$  negativas, invalidando físicamente las áreas BET calculadas mediante el modelo clásico, los resultados del análisis *t-plot* mostraron áreas de microporos del orden de  $326\text{--}558 \text{ m}^2/\text{g}$ . Aunque estos valores deben interpretarse con cautela debido a las limitaciones experimentales observadas, sugieren igualmente una contribución importante de microporos accesibles dentro de la estructura del carbón activado.

En materiales destinados a captura DAC, la microporosidad resulta relevante debido a que los microporos constituyen los principales sitios activos de adsorción de  $\text{CO}_2$ , mientras que el área BET representa una medida más global de superficie accesible que también incluye contribuciones de mesoporos y superficie externa. Los resultados evidencian que, aun cuando el carbón utilizado presenta áreas microporosas inferiores a las reportadas para adsorbentes DAC avanzados, fue capaz de reducir de manera consistente la concentración de  $\text{CO}_2$  en el sistema batch. Esto sugiere que el material posee un grado de activación suficiente para aplicaciones experimentales de captura de  $\text{CO}_2$ , particularmente considerando que se trata de un carbón comercial originalmente destinado a otras aplicaciones de adsorción.

Adicionalmente, el valor experimental de  $\text{pH}_{pzc}$  obtenido ( $8.43 \pm 0.10$ ) confirma un carácter superficial moderadamente básico, favorable para la interacción con gases ácidos como el  $\text{CO}_2$ . La presencia de sitios básicos superficiales puede favorecer interacciones ácido-base de Lewis y contribuir a mejorar la afinidad del material hacia el  $\text{CO}_2$  bajo condiciones DAC. En conjunto, los resultados sugieren que el carbón activado empleado presenta un grado de activación suficiente para demostrar captura de  $\text{CO}_2$  en sistemas DAC a escala experimental. No obstante, el desempeño del material podría potencialmente mejorarse mediante estrategias de funcionalización superficial, activación adicional o mediante el uso de carbones específicamente diseñados para DAC, con mayor microporosidad efectiva y mayor afinidad química hacia el  $\text{CO}_2$ .

## Capítulo 7

# Conclusiones y Recomendaciones

El presente estudio evalúa la influencia de la morfología geométrica de pellets monolíticos de carbón activado sobre su desempeño en la captura directa de  $\text{CO}_2$  (DAC), bajo condiciones ambientales reales. Se diseña y construye un sistema experimental en modo batch, operado mediante ciclos de adsorción-desorción, lo que permite analizar de manera reproducible la capacidad de adsorción de pellets moldeados a partir de carbón activado en polvo y carboximetilcelulosa como aglutinante.

Los monolitos superan al carbón activado granular en capacidad de adsorción y eficiencia, alcanzando valores entre 70–150 mg  $\text{CO}_2$ /kg CA, frente a menos de 40 mg  $\text{CO}_2$ /kg CA en la forma granular. Esto apoya las ventajas de las estructuras regulares y de flujo canalizado, donde la transferencia de masa es más homogénea y el contacto gas-sólido se optimiza por el ordenamiento geométrico de los canales. La reducción del espesor de pared y del tamaño de canal muestra tendencias claras en los diseños iniciales; sin embargo, el análisis ampliado con los diseños 4, 5 y 6 evidencia que la relación entre geometría y desempeño adsorptivo es más compleja que lo sugerido únicamente por los parámetros dimensionales. En particular, la disminución del espesor de 7 mm a 5 mm incrementa la capacidad de captura en un 25–40%, atribuible a una menor resistencia por difusión y a una mayor fracción de área activa accesible. Esto confirma que canales más pequeños incrementan la relación área/volumen en torno al 40%, mejorando el contacto gas-sólido, aunque dicho efecto se ve limitado por la difusividad efectiva en geometrías extremas, como se evidencia en los pellets de menor canal y menor espesor.

El diseño 4 (4 mm/4 mm) presenta el mejor desempeño experimental, con una reducción de concentración de  $\text{CO}_2$  en el aire desde 491 ppm hasta 158 ppm dentro del aparato de captura, lo

que corresponde a la mayor eficiencia de remoción entre los casos evaluados. Su área efectiva de contacto alcanza  $0.0603 \text{ m}^2$ , superior a la de los diseños 2 y 3 ( $0.0358\text{--}0.0438 \text{ m}^2$ ), lo que indica que una combinación de espesores intermedios y canales moderadamente pequeños maximiza la accesibilidad real de la superficie adsorbente y la utilización efectiva del volumen de carbón activado. En contraste, los diseños 5 y 6, a pesar de presentar mayores valores teóricos de área, no logran traducir dicha superficie en un mejor desempeño, posiblemente debido a irregularidades geométricas, menor estabilidad estructural y una menor accesibilidad efectiva del  $\text{CO}_2$  hacia parte de la superficie interna disponible.

Desde una perspectiva técnico-económica, el Diseño 4 también se posiciona como la alternativa más competitiva. El sistema presenta un CAPEX total de \$21.809.826 para una capacidad de  $600 \text{ tCO}_2/\text{año}$ , lo que corresponde a aproximadamente  $36.350 \text{ USD}/(\text{tCO}_2/\text{año})$  de capacidad instalada. Asimismo, el costo nivelado de captura (LCOC) alcanza un valor de  $6.040 \text{ USD}/\text{tCO}_2$ , significativamente inferior al sistema basado en carbón granular ( $8.957 \text{ USD}/\text{tCO}_2$ ). Esta reducción se traduce en un ahorro acumulado cercano a USD 7,51 millones respecto al uso de carbón granular durante la vida útil del proyecto, asociado principalmente a una mayor eficiencia de captura y menores requerimientos energéticos.

Finalmente, la caracterización textural y superficial del carbón activado permitió complementar la interpretación del desempeño observado en la captura de  $\text{CO}_2$ . Los análisis de adsorción de  $\text{N}_2$  presentaron limitaciones en la aplicación del modelo BET, debido a la obtención de valores negativos de la constante C, los cuales no poseen interpretación física y evidencian que los supuestos del modelo no se cumplen adecuadamente en el material analizado. Sin embargo, el valor de  $\text{pH}_{\text{pzc}}$  de  $8.43 \pm 0.10$  indicó un carácter superficial moderadamente básico, favorable para interacciones con  $\text{CO}_2$ . En conjunto, estos resultados sugieren que el carbón activado utilizado presenta propiedades adecuadas para captura directa de  $\text{CO}_2$ , siendo las diferencias de desempeño entre pellets principalmente atribuibles a factores geométricos y estructurales.

En conjunto, los resultados demuestran que el desempeño de los sistemas DAC basados en adsorción no depende únicamente del área superficial, sino de la interacción entre propiedades texturales, químicas y geométricas. La optimización de la estructura monolítica permite maximizar la accesibilidad del área activa y reducir las resistencias difusivas, consolidando a los monolitos como una alternativa prometedora frente a configuraciones granulares en aplicaciones de captura directa de  $\text{CO}_2$ .

# Referencias

- [1] United Nations Environment Programme. Emissions gap report 2023: Broken record – temperatures hit new. <https://wedocs.unep.org/handle/20.500.11822/43922>, 2023.
- [2] Dilanth De Silva, P. G. Ranjith, and Samintha Perera. Geochemical aspects of CO<sub>2</sub> sequestration in deep saline aquifers: A review. *Fuel*, 155:128–143, 2015.
- [3] Global Carbon Budget, Hannah Ritchie, Pablo Rosado, and Max Roser. Annual CO<sub>2</sub> emissions. <https://archive.ourworldindata.org/20260304-094028/grapher/annual-co2-emissions-per-country.html>, 2025. Dataset: Global Carbon Budget v15, con procesamiento adicional por Our World in Data.
- [4] Farihahusnah Hussin, Nur Nadira Hazani, and Mohamed Kheireddine Aroua. The effect of physicochemical properties and surface chemistry on CO<sub>2</sub> adsorption capacity of potassium acetate-treated carbon pellets. *Sustainability*, 15(6):4903, 2023.
- [5] M. Adewumi, T. Mamo, A. Regassa, H. Yosef, and A. Rashik. Adsorption studies on heterogeneous surfaces: A review. *Journal of Adsorption Science*, 15(3):145–162, 2022.
- [6] Christoph Beuttler, Louise Charles, and Jan Wurzbacher. The role of direct air capture in mitigation of anthropogenic greenhouse gas emissions. *Frontiers in Climate*, 1:00010, 2019.
- [7] Y. Y. Li, S. P. Perera, and B. D. Crittenden. *Zeolite monoliths for air separation Part 2: Oxygen enrichment, pressure drop and pressurization*, volume 76. Elsevier, Bath, UK, 1998.
- [8] Hyungwoong Ahn and Stefano Brandani. Dynamics of carbon dioxide breakthrough in a carbon monolith over a wide concentration range. *Department of Chemical Engineering, University College London*, 2005.

- [9] Zhengzhou Kelin Water Purification Material Co., Ltd. Honeycomb activated carbon – product description and company profile, 2025. Información complementaria extraída de la página corporativa de Kelin Carbon. Obtenido de <https://www.kelincarbon.com>.
- [10] G. Polak, P. Baran, J. Szczurowski, and K. Zarębska. Advancements in gas phase pollutant removal: A comprehensive study on the sorption of CO<sub>2</sub> and SO<sub>2</sub> on modified carbon monoliths. *Chemical Engineering Journal*, 82:112–126, 2024.
- [11] L. Martín. *Conversión de CO<sub>2</sub> a Combustibles Líquidos*. Escuela Técnica Superior de Ingenieros, Spain, 2024.
- [12] Steve Robert Tennison. Production and properties of polymer-derived carbons for medical applications. In Zulkhair A. Mansurov, editor, *Carbon Nanomaterials in Biomedicine and the Environment*, page n/a. Jenny Stanford Publishing, Addlestone, Surrey, UK, 2020.
- [13] Mai Bui and Niall Mac Dowell. *Introduction – Carbon Capture and Storage*. Centre for Environmental Policy, Imperial College London, London, UK, 2024.
- [14] G. Li and J. Yao. Direct air capture (dac) for achieving net-zero CO<sub>2</sub> emissions: Advances, applications, and challenges. *Engineering*, 5:1298–1336, 2024.
- [15] Farzan Kazemifar. A review of technologies for carbon capture, sequestration, and utilization: Cost, capacity, and technology readiness. *San José State University*, 2023.
- [16] Noah McQueen, Katherine Vaz Gomes, Colin McCormick, Katherine Blumanthal, Maxwell Pisciotta, and Jennifer Wilcox. A review of direct air capture (dac): scaling up commercial technologies and innovating for the future. *Progress in Energy*, 2(3):032001, 2020.
- [17] May-Yin Low, Lucy Victoria Barton, Ronny Pini, and Camille Petit. Analytical review of the current state of knowledge of adsorption materials and processes for direct air capture. *Chemical Engineering Research and Design*, 191:114–132, 2022.
- [18] Keju An, Kai Li, Cheng-Min Yang, Jamieson Brechtel, and Kashif Nawaz. A comprehensive review on regeneration strategies for direct air capture. *Review Article*, 2024.
- [19] Jan F. Wiegner, Alexa Grimm, Lukas Weimann, and Matteo Gazzani. Optimal design and operation of solid sorbent direct air capture processes at varying ambient conditions. *Industrial Engineering Chemistry Research*, 61(32):12649–12667, 2022.
- [20] R. Treybal. *Operaciones de Transferencia de Masa*. McGraw-Hill, Universidad de Rhode Island, Estados Unidos, 1986.

- [21] Aimé Serge Ello, Luiz K.C. de Souza, Albert Trokourey, and Mietek Jaroniec. Coconut shell-based microporous carbons for CO<sub>2</sub> capture. *Microporous and Mesoporous Materials*, 184:1–9, 2013.
- [22] Jia Yen Lai, Lock Hei Ngu, and Siti Salwa Hashim. A review of CO<sub>2</sub> adsorbents performance for different carbon capture technology processes conditions. *Greenhouse Gas Science and Technology*, 0:1–41, 2021.
- [23] Y. Ji, R.Y. Xie, C. Wu, X.Y. Liu, X.J. Zhang, and L. Jiang. Cost-effective carbon-based amine adsorbents for carbon capture: Equilibrium, kinetics and selectivity. *Journal of CO<sub>2</sub> Utilization*, 69:102357, 2023.
- [24] Hedi Jedli, Maha Almonnef, Raja Rabhi, Mohamed Mbarek, Jbara Abdessalem, and Khalifa Slimi. Activated carbon as an adsorbent for co<sub>2</sub> capture: Adsorption, kinetics, and rsm modeling. *ACS Omega*, 9:2080–2087, 2024.
- [25] L. Yue, Q. Xia, L. Wang, L. Wang, H. DaCosta, J. Yang, and X. Hu. CO<sub>2</sub> adsorption at nitrogen-doped carbons prepared by K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> activation of urea-modified coconut shell. *Journal of Colloid and Interface Science*, 511:259–267, 2018.
- [26] L. Guo, J. Yang, G. Hu, X. Hu, L. Wang, Y. Dong, H. DaCosta, and M. Fan. Role of hydrogen peroxide preoxidizing on CO<sub>2</sub> adsorption of nitrogen-doped carbons produced from coconut shell. *ACS Sustainable Chemistry Engineering*, 4:2806–2813, 2016.
- [27] J. Chen, J. Yang, G. Hu, X. Hu, Z. Li, S. Shen, M. Radosz, and M. Fan. Enhanced CO<sub>2</sub> capture capacity of nitrogen-doped biomass-derived porous carbons. *ACS Sustainable Chemistry Engineering*, 4:1439–1445, 2016.
- [28] Y. Ji, C. Zhang, X.J. Zhang, P.F. Xie, C. Wu, and L. Jiang. A high adsorption capacity bamboo biochar for CO<sub>2</sub> capture for low temperature heat utilization. *Separation and Purification Technology*, 293:121131, 2022.
- [29] I.S. Ismail, N.A. Rashidi, and S. Yusup. Production and characterization of bamboo-based activated carbon through single-step h<sub>3</sub>po<sub>4</sub> activation for co<sub>2</sub> capture. *Environmental Science and Pollution Research*, 29:12434–12440, 2022.
- [30] F. Shen, Y. Wang, L. Li, K. Zhang, R.L. Smith, and X. Qi. Porous carbonaceous materials from hydrothermal carbonization and koh activation of corn stover for highly efficient CO<sub>2</sub> capture. *Chemical Engineering Communications*, 205:423–431, 2018.

- [31] Y. Guo, C. Tan, J. Sun, W. Li, J. Zhang, and C. Zhao. Porous activated carbons derived from waste sugarcane bagasse for CO<sub>2</sub> adsorption. *Chemical Engineering Journal*, 381:122736, 2020.
- [32] X. Yuan, J.G. Lee, H. Yun, S. Deng, Y.J. Kim, J.E. Lee, S.K. Kwak, and K.B. Lee. Solving two environmental issues simultaneously: Waste polyethylene terephthalate plastic bottle-derived microporous carbons for capturing CO<sub>2</sub>. *Chemical Engineering Journal*, 397:125350, 2020.
- [33] R. Pang, T. Lu, J. Shao, L. Wang, X. Wu, X. Qian, and X. Hu. Highly efficient nitrogen-doped porous carbonaceous CO<sub>2</sub> adsorbents derived from biomass. *Energy Fuels*, 35:1620–1628, 2020.
- [34] Lisa Joss, Matteo Gazzani, Max Hefti, Dorian Marx, and Marco Mazzotti. Temperature swing adsorption for the recovery of the heavy component: An equilibrium-based shortcut model. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 53(5):1819–1830, 2014.
- [35] Augustine Ntiamoah, Jianghua Ling, Penny Xiao, Paul A. Webley, and Yuchun Zhai. CO<sub>2</sub> Capture by Temperature Swing Adsorption: Use of Hot CO<sub>2</sub>-Rich Gas for Regeneration. *Cooperative Research Centre for Greenhouse Gas Technologies (CO2CRC)*, 2016.
- [36] Nan Jiang, Yuanhui Shen, Bing Liu, Donghui Zhang, Zhongli Tang, Guobing Li, and Bo Fu. Co<sub>2</sub> capture from dry flue gas by means of vpsa, tsa and tvsa. *Journal of CO<sub>2</sub> Utilization*, 35:153–168, 2020.
- [37] Rafael M. Siqueira, Geovane R. Freitas, Hugo R. Peixoto, Jailton F. do Nascimento, Ana Paula S. Musse, Antonio E. B. Torres, Diana C. S. Azevedo, and Moises Bastos-Neto. Carbon dioxide capture by pressure swing adsorption. In *13th International Conference on Greenhouse Gas Control Technologies, GHGT-13*, pages 14–18, Lausanne, Switzerland, 2016. Universidade Federal do Ceará.
- [38] Junpeng Tian, Yuanhui Shen, Donghui Zhang, and Zhongli Tang. Co<sub>2</sub> capture by vacuum pressure swing adsorption from dry flue gas with a structured composite adsorption medium. *Journal of Cleaner Production*, 2022.
- [39] Sean M.W. Wilson. High purity CO<sub>2</sub> from direct air capture using a single tvsa cycle with na-x zeolites. *Separation and Purification Technology*, 294:121186, 2022.
- [40] S. et al. García. The role of surface chemistry on CO<sub>2</sub> adsorption in biomass-derived porous carbons by experimental results and molecular dynamics simulations, 2023. Accessed: March 24, 2025.

- [41] Y. et al. Wang. CO<sub>2</sub> breakthrough curves during CO<sub>2</sub> capture from air passed down flow through 25 wt% activated carbon beds, 2022.
- [42] Z. et al. Wu. Porous carbon pellets for physical adsorption of CO<sub>2</sub>: Size and shape effect, 2024. Accessed: March 24, 2025.
- [43] Jarosław Serafin, Martyna Baca, Marcin Biegun, Ewa Mijowska, Ryszard J. Kaleńczuk, Joanna Sreńscek-Nazzal, and Beata Michalkiewicz. Direct conversion of biomass to nanoporous activated biocarbons for high CO<sub>2</sub> adsorption and supercapacitor applications. *Journal of CO<sub>2</sub> Utilization*, 29:249–259, 2019.
- [44] Zulay Rivas, José Sánchez, Federico Troncone, Rómulo Márquez, Hilda Ledo de Medina, Marinela Colina, and Elizabeth Gutiérrez. Nitrógeno y fósforo totales de los ríos tributarios al sistema lago de maracaibo, venezuela. *Interciencia*, 34(5):308–314, 2009.
- [45] V. M. Lowden. Preparación y caracterización de carbón activado de cáscara de coco. aplicaciones en la adsorción de solutos en disolución acuosa, 2022.
- [46] M. et al. Ahmad. The role of different properties of activated carbon in CO<sub>2</sub> adsorption, 2015.
- [47] J. Laine and A. Calafat. Factors affecting the preparation of activated carbons from coconut shell catalyzed by phosphoric acid. *Carbon*, 29(7):949–953, 1991.
- [48] J. Laine, A. Calafat, and M. Labady. Preparation and characterization of activated carbons from coconut shell impregnated with phosphoric acid. *Carbon*, 27(2):191–195, 1989.
- [49] Z. Hu and M. P. Srinivasan. Preparation of high-surface-area activated carbons from coconut shell. *Microporous and Mesoporous Materials*, 27(1):11–18, 1999.
- [50] N. Yoshizawa, K. Maruyama, Y. Yamada, and M. Zielinska-Blajet. Xps analyses of oxygen-containing functional groups in activated carbons. *Fuel*, 79(12):1461–1466, 2000.
- [51] W. Su, L. Zhou, and Y. Zhou. Competitive adsorption of co<sub>2</sub> and n<sub>2</sub> on activated carbon. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 14(2):266–269, 2006.
- [52] D. C. S. Azevedo, J. C. S. Araújo, M. B. Bastos-Neto, A. E. B. Torres, E. Jaguarribe, and C. Cavalcante. Microporous activated carbon prepared from coconut shells using chemical activation with zinc chloride. *Microporous and Mesoporous Materials*, 100(1–3):361–364, 2007.
- [53] G. Afrane and O.-W. Achaw. The use of agricultural waste in the preparation of activated carbon for adsorption of surfactants from water. *Bioresource Technology*, 99(15):6678–6682, 2008.

- [54] S. Guo, J. Peng, W. Li, K. Yang, L. Zhang, S. Zhan, and H. Xia. Effects of  $\text{CO}_2$  activation on porous structures of coconut shell-based activated carbons. *Applied Surface Science*, 255(20):8443–8449, 2009.
- [55] A. T. Mohd-Din, B. H. Hameed, and A. Ahmad. Batch adsorption of phenol onto physiochemical-activated coconut shell. *Journal of Hazardous Materials*, 161(2–3):1522–1529, 2009.
- [56] K. Yang, J. Peng, H. Xia, L. Zhang, C. Srinivasakannan, and S. Guo. Preparation of high surface area activated carbon from coconut shells using microwave heating. *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, 41(4):367–372, 2010.
- [57] A. L. Cazetta, A. M. M. Vargas, E. M. Nogami, M. H. Kunita, M. R. Guilherme, A. C. Martins, T. L. Silva, J. C. G. Morais, and V. C. Almeida. *Chemical Engineering Journal*, 174:117–125, 2011.
- [58] Sina Esfandiar Pour, Alireza Haghighat Mamaghani, and Zaher Hashisho. Modeling of adsorption process on monolith adsorbents: A mini-review. *Review*, 2024.
- [59] J. De Boer. *The Dynamical Character of Adsorption*. Oxford University Press, Oxford, 1968.
- [60] P. Martínez and E. Rus. *Operaciones de Separación en Ingeniería Química*. Pearson: Prentice Hall, Málaga, España, 2004. Universidad de Málaga.
- [61] M. D. Putra et al. Simulation on the breakthrough curve during  $\text{CO}_2$  adsorption from biogas in a fixed bed column, 2023.
- [62] Shrinjay Sharma, Salvador R. G. Balestra, Richard Baur, Umang Agarwal, Erik Zuidema, and Marcello S. Rigutto. RUPTURA: simulation code for breakthrough, ideal adsorption solution theory computations, and fitting of isotherm models. *Molecular Simulation*, 49(10):893–953, 2023.
- [63] M. et al. Mokhtar. The effect of physicochemical properties and surface chemistry on  $\text{CO}_2$  adsorption capacity of potassium acetate-treated carbon pellets, 2023. Accessed: March 24, 2025.
- [64] Comparative study of  $\text{CO}_2$  capture by adsorption in sustainable date pits-derived porous activated carbon and molecular sieve. *PMC*, 2025.
- [65] Hedi Jedli, Maha Almonnef, Raja Rabhi, Mohamed Mbarek, Jbara Abdessalem, and Khalifa Slimi. Activated carbon as an adsorbent for  $\text{CO}_2$  capture: Adsorption, kinetics, and rsm modeling. *ACS Omega*, 9(2):2080–2087, 2024.

- [66] E. Vilaplana-Ortego, J. Alcañiz-Monge, D. Cazorla-Amorós, and A. Linares-Solano. Activated carbon fibre monoliths. *Fuel Processing Technology*, 77–78:173–177, June 2002.
- [67] Jair Fernando Rangel-Sequeda, Margarita Loredó-Cancino, Vicente Ismael Agueda Maté, David Alejandro De Haro-Del Río, and Nancy Elizabeth Dávila-Guzmán. 3d printing of powdered activated carbon monoliths: Effect of structuring on physicochemical and mechanical properties and its influence on the adsorption performance. *Materials Today Communications*, 33:104758, 2022.
- [68] Paul de Joannis, Christophe Castel, Mohamed Kanniche, Eric Favre, and Olivier Authier. Techno-economic analysis of packed bed and structured adsorbent for direct air capture. *Carbon Capture Science & Technology*, 17:100518, 2025.
- [69] Arash Arami-Niya, Thomas E. Rufford, and Zhonghua Zhu. Activated carbon monoliths with hierarchical pore structure from tar pitch and coal powder for the adsorption of CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub> and N<sub>2</sub>. *Carbon*, 103:115–124, 2016.
- [70] Yuhan Wang, Cristina Stere, Geoffrey McCullough, Mingyang Li, and Alexandre Goguet. Investigation of the deactivation of a washcoated monolith using a spatially resolved technique. *Catalysis Science & Technology*, 13(6):1802–1817, 2023.
- [71] A. Motealleh and A. R. Boccaccini. 3d printed monolithic structures for gas adsorption applications. *Additive Manufacturing*, 41:101952, 2021.
- [72] S. Deng and Y. P. Ting. Influence of monolith wall thickness on CO<sub>2</sub> adsorption performance. *Microporous and Mesoporous Materials*, 132(1–2):202–208, 2010.
- [73] Maria João Regufe, Alexandre F.P. Ferreira, José Miguel Loureiro, Alírio Rodrigues, and Ana Mafalda Ribeiro. Electrical conductive 3d-printed monolith adsorbent for CO<sub>2</sub> capture. *Microporous and Mesoporous Materials*, 283:169–176, 2019.
- [74] B.P. Spigarelli and S.K. Kawatra. Opportunities and challenges in carbon dioxide capture. *Journal of CO<sub>2</sub> Utilization*, 1:69–87, 2013.
- [75] W. Lu, J.P. Sculley, D. Yuan, R. Krishna, and H.-C. Zhou. Carbon dioxide capture from air using amine-grafted porous polymer networks. *The Journal of Physical Chemistry C*, 117(8):4057–4061, 2013.
- [76] Ethan Grigor, Joseph Carver, Edric Bulan, Stuart Scott, John Chew, and Semali Perera. A new generation of activated carbon adsorbent microstructures. *Advanced Science*, 11, 09 2024.

- [77] J. Saleem, U.B. Shahid, M. Hijab, H. Mackey, and G. McKay. Production and applications of activated carbons as adsorbents from olive stones. *Biomass Conversion and Biorefinery*, 9(4):775–802, 2019.
- [78] J. Silvestre-Albero and F. Rodríguez-Reinoso. Nuevos materiales de carbón para la captura de  $\text{CO}_2$ . Technical report, Laboratorio de Materiales Avanzados, Departamento de Química Inorgánica, Instituto Universitario de Materiales, Universidad de Alicante, Alicante, España, 2012.
- [79] A. Sinha, L. Darunte, C. Jones, M. Realff, and Y. Kawajiri. Systems design and economic analysis of direct air capture of  $\text{CO}_2$  through temperature vacuum swing adsorption using mil-101(cr)-pei-800 and mmen- $\text{Mg}_2(\text{dobpdc})$  mof adsorbents. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 56:750–764, 2017.
- [80] Ministerio de Economía, Fomento y Turismo and Corporación de Fomento de la Producción (CORFO). Hif y corfo impulsan primer proyecto de captura directa de aire en chile para producir combustibles carbono-neutrales, 2024.
- [81] Max S. Peters, Klaus D. Timmerhaus, and Ronald E. West. *Plant Design and Economics for Chemical Engineers*. McGraw-Hill, New York, 5 edition, 2003.

# Apéndice A

## Dispositivo DAC

A continuación, se presenta una imagen del dispositivo de captura DAC de la presente investigación funcionando con un lecho de 3 pellets monolitos.

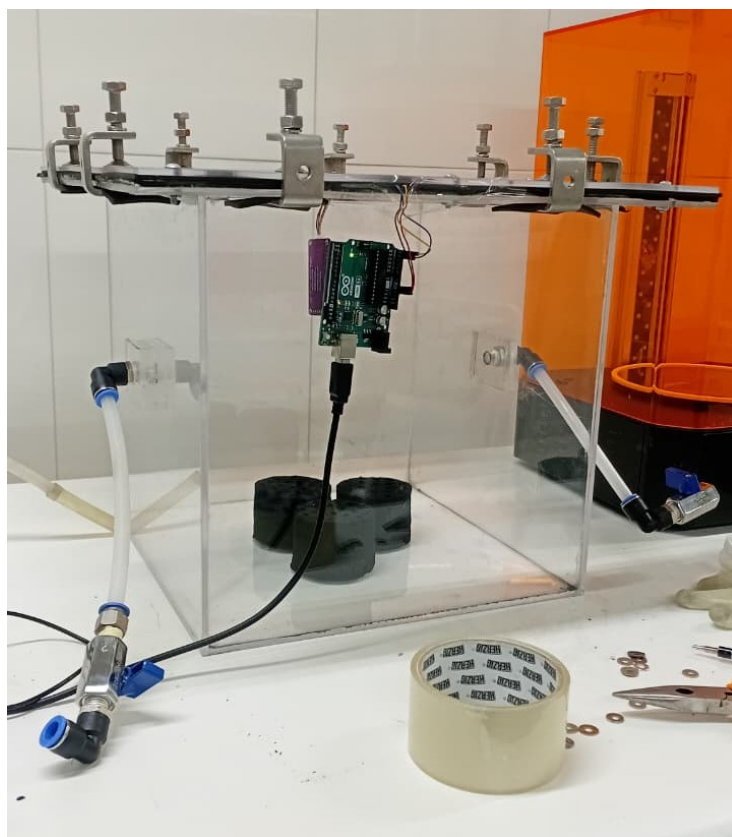


Figura A.1: Dispositivo de captura DAC a partir de carbón activado

# Apéndice B

## Isotermas de adsorción–desorción de N<sub>2</sub>

En este anexo se presentan los resultados completos de adsorción–desorción de nitrógeno a 77 K correspondientes a las muestras de carbón activado analizadas en este trabajo. Los resultados se incluyen con fines de trazabilidad experimental y como información complementaria a la caracterización del material.

## B.1 Isoterma de adsorción–desorción de $N_2$ del carbón activado en polvo

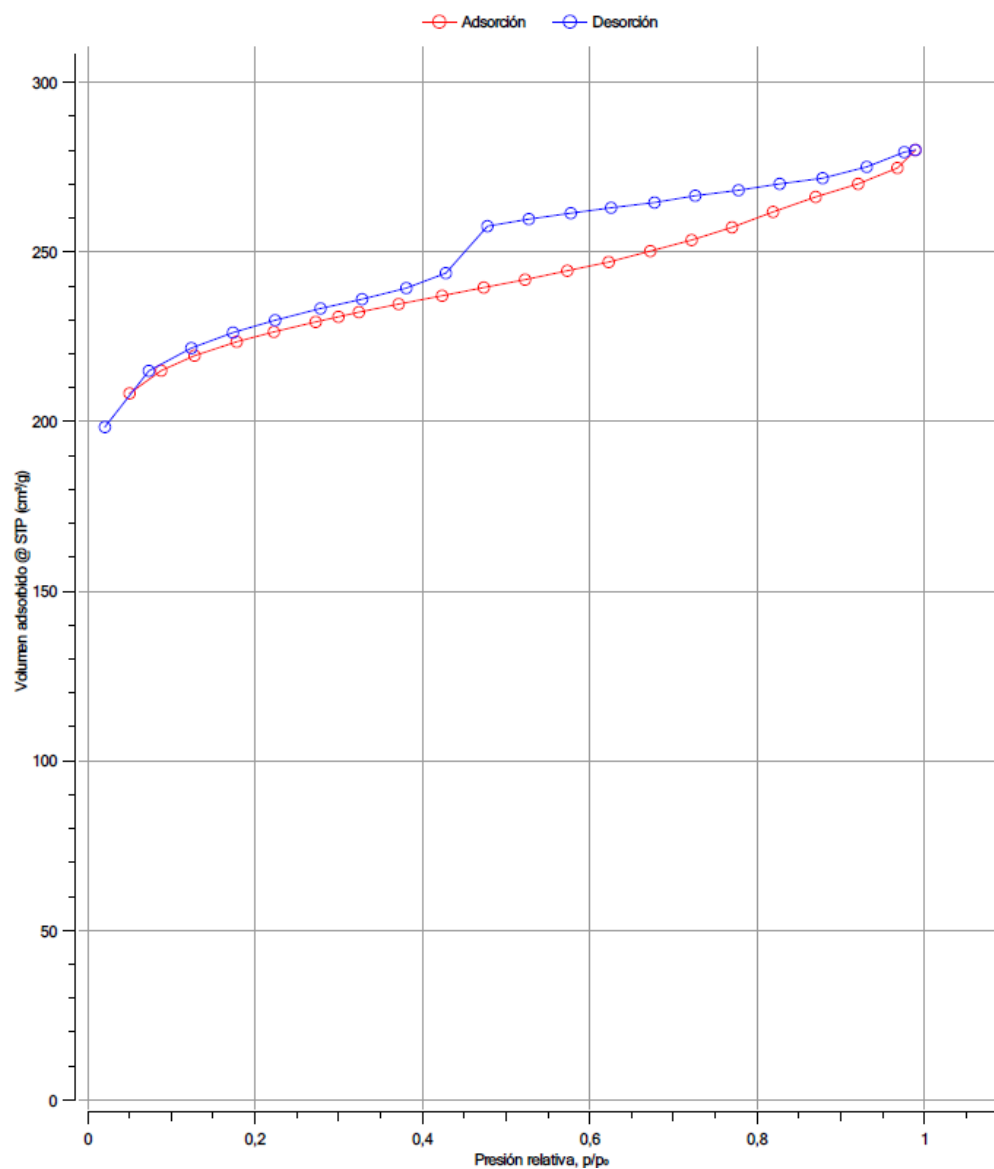


Figura B.1: Isoterma de adsorción–desorción de  $N_2$  a 77 K para la muestra de carbón activado en polvo.

## B.2 Isoterma de adsorción-desorción de $N_2$ del pellet diseño 4

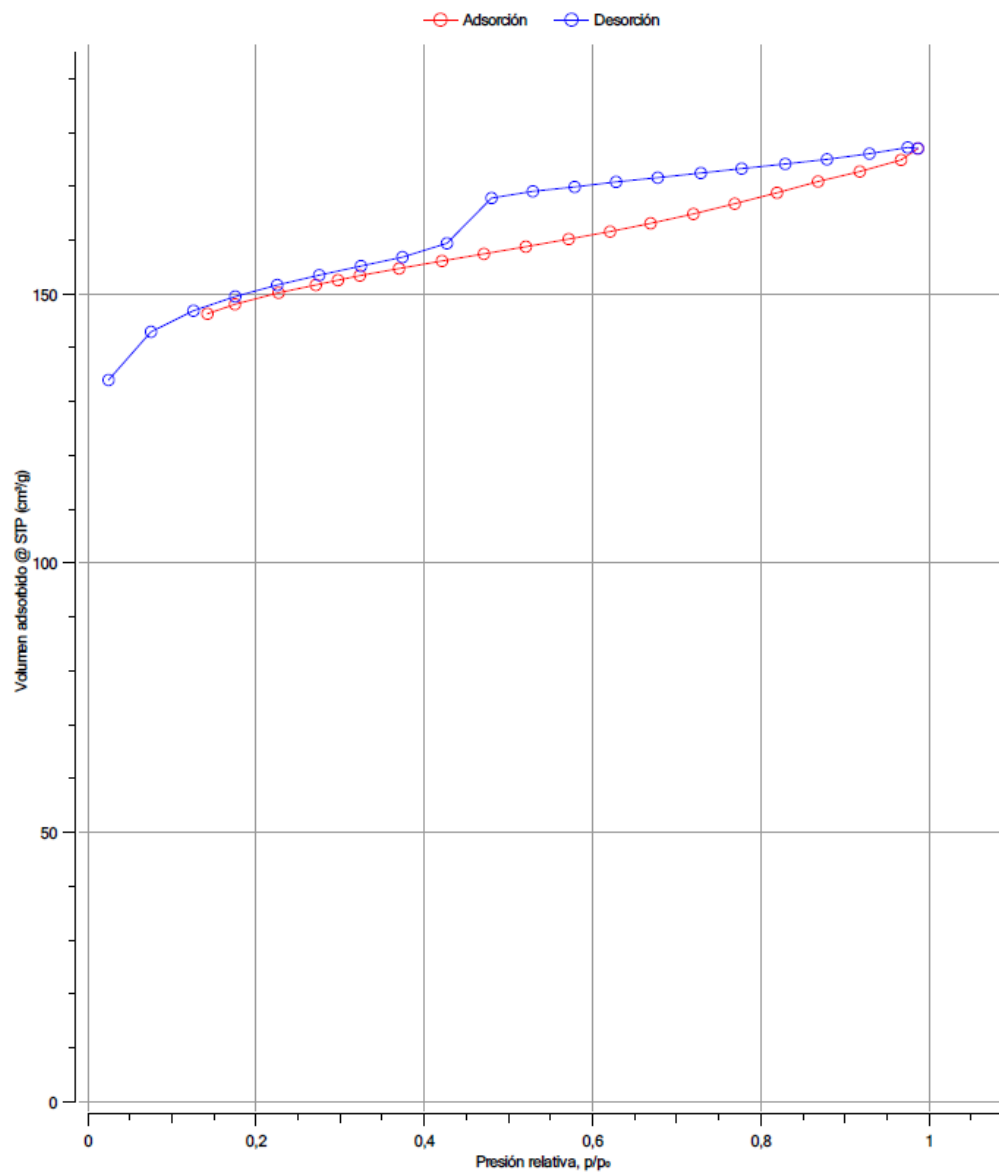


Figura B.2: Isotermas de adsorción-desorción de  $N_2$  a 77 K para pellets monolíticos de carbón activado (Diseño 4).

### B.3 Isotherma de adsorción–desorción de $N_2$ del pellet diseño 5

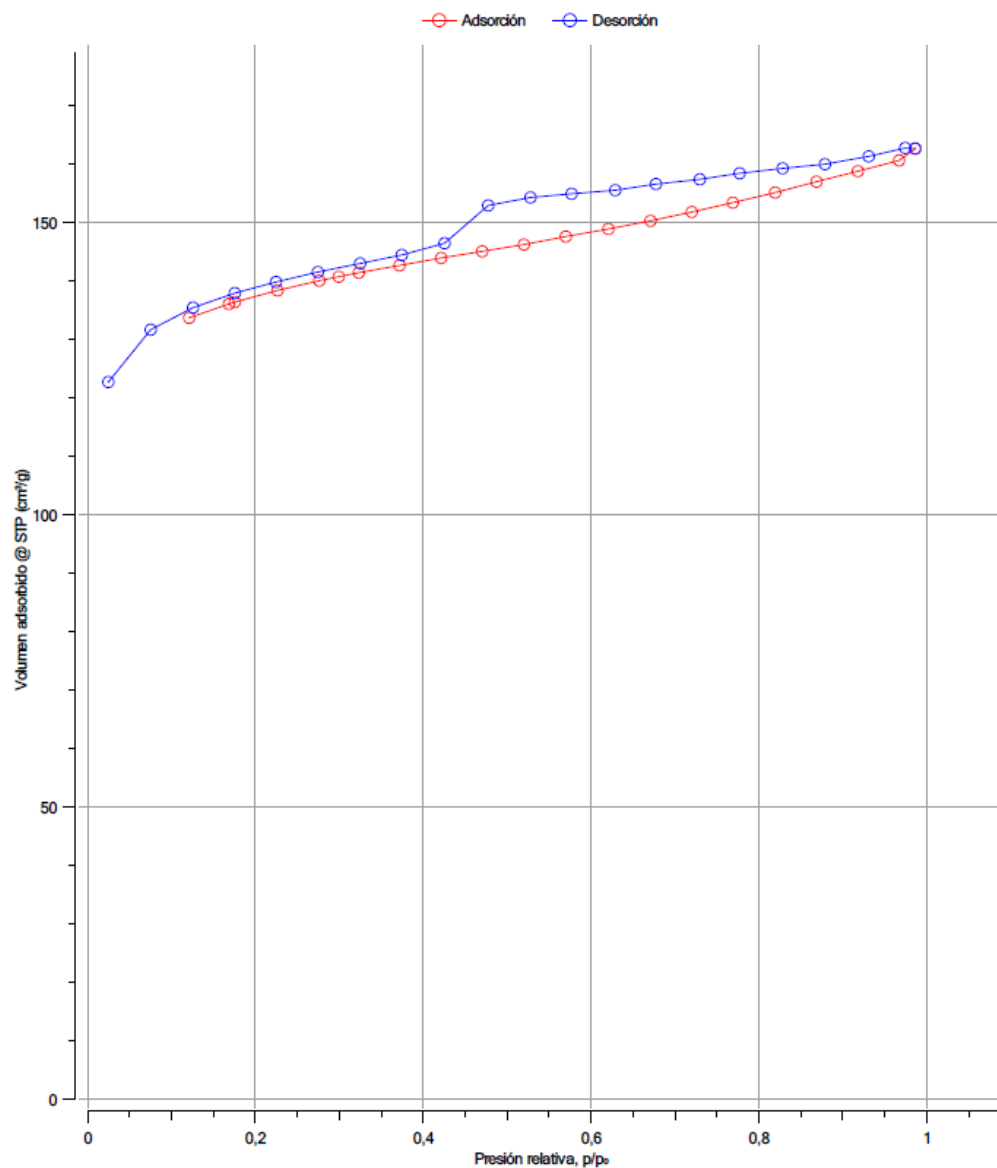


Figura B.3: Isothermas de adsorción–desorción de  $N_2$  a 77 K para pellets monolíticos de carbón activado (Diseño 5).

## B.4 Isoterma de adsorción-desorción de $N_2$ del pellet diseño 6

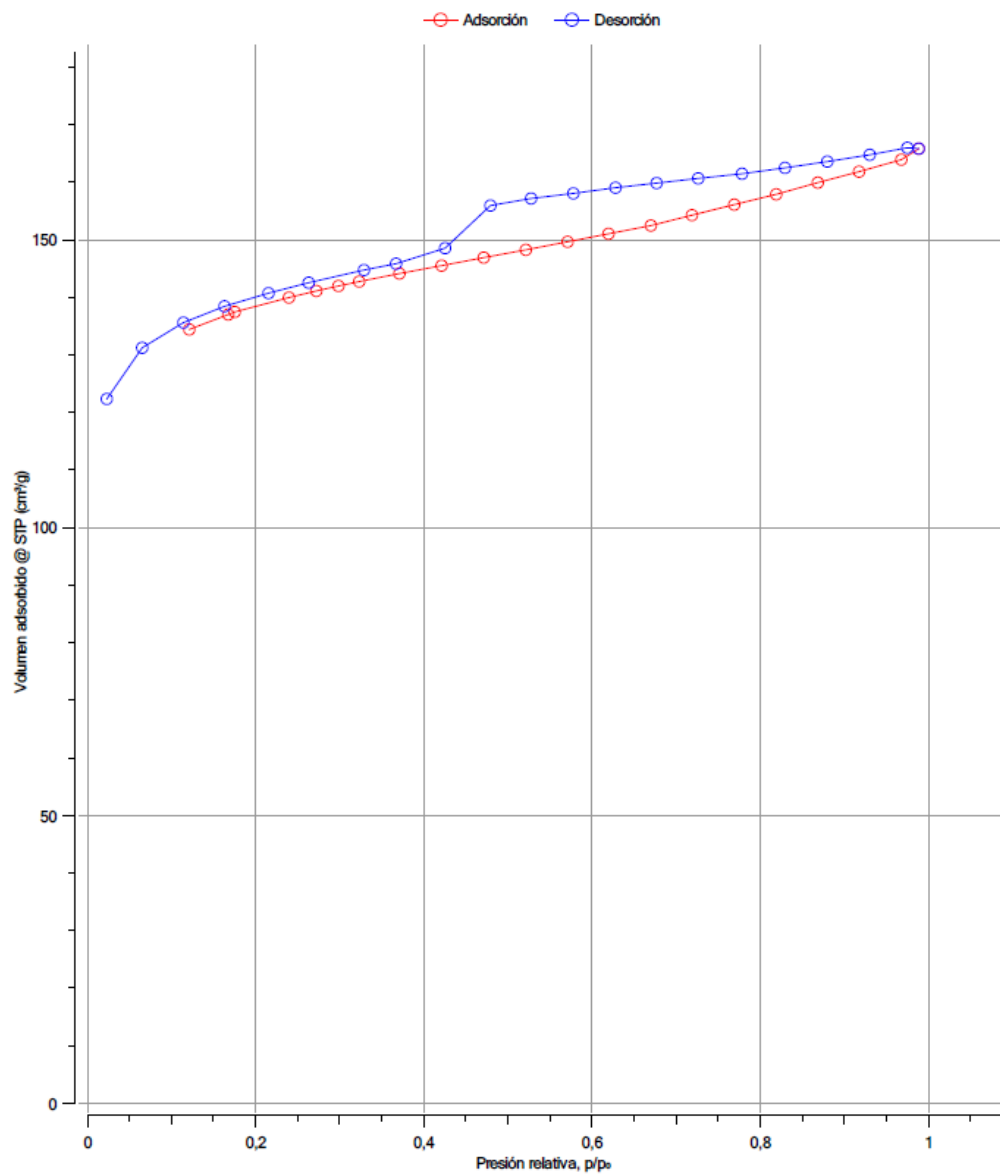


Figura B.4: Isotermas de adsorción-desorción de  $N_2$  a 77 K para pellets monolíticos de carbón activado (Diseño 6).

## B.5 Isoterma de adsorción-desorción de $N_2$ del pellet diseño 4 molido

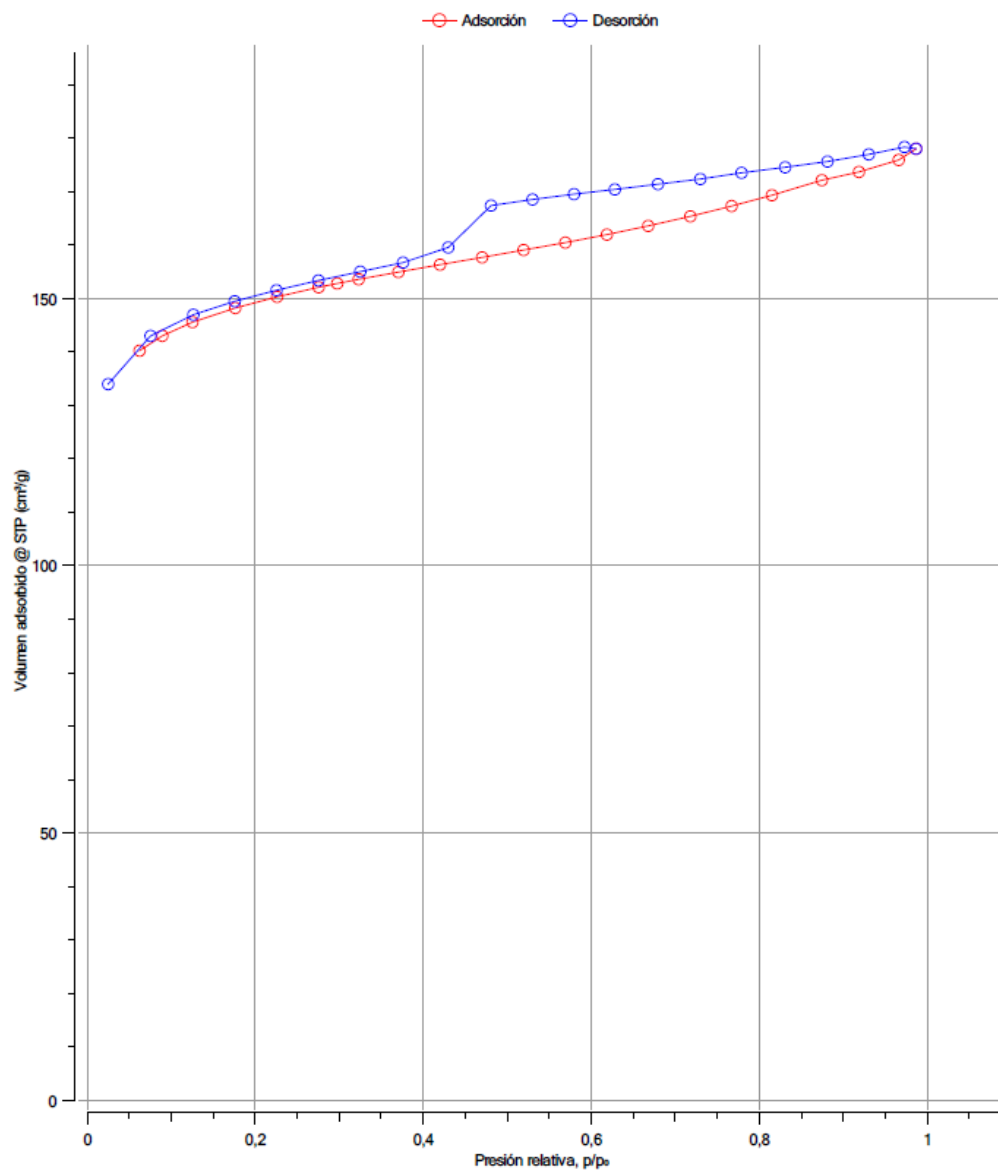


Figura B.5: Isoterma de adsorción-desorción de  $N_2$  a 77 K para pellets monolíticos de carbón activado triturados (Diseño 4).

## Apéndice C

### Análisis de microporosidad mediante método *t-plot*

El análisis de la estructura microporosa del carbón activado de cáscara de coco se realizó mediante el método *t-plot*, el cual permite estimar de forma separada la contribución del área superficial asociada a microporos y del área superficial externa, a partir de isotermas de adsorción de N<sub>2</sub> a 77 K. A continuación, se presentan los análisis *t-plot* correspondientes a las distintas morfologías de carbón activado evaluadas en este estudio.

## C.1 Análisis *t*-plot de carbón activado en polvo

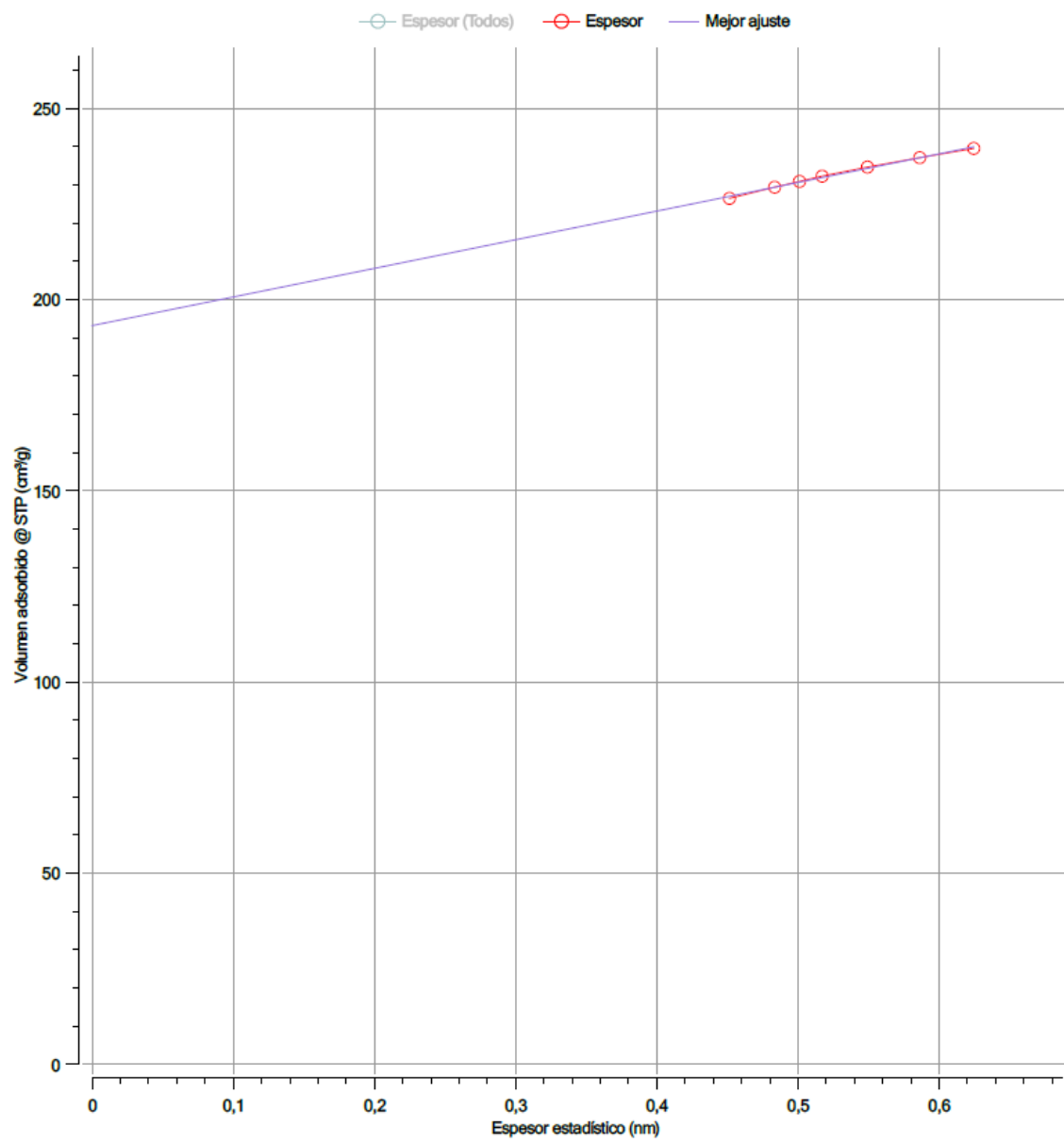


Figura C.1: Análisis *t*-plot de la muestra de de carbón activado en polvo.

## C.2 Análisis *t*-plot del pellet diseño 4

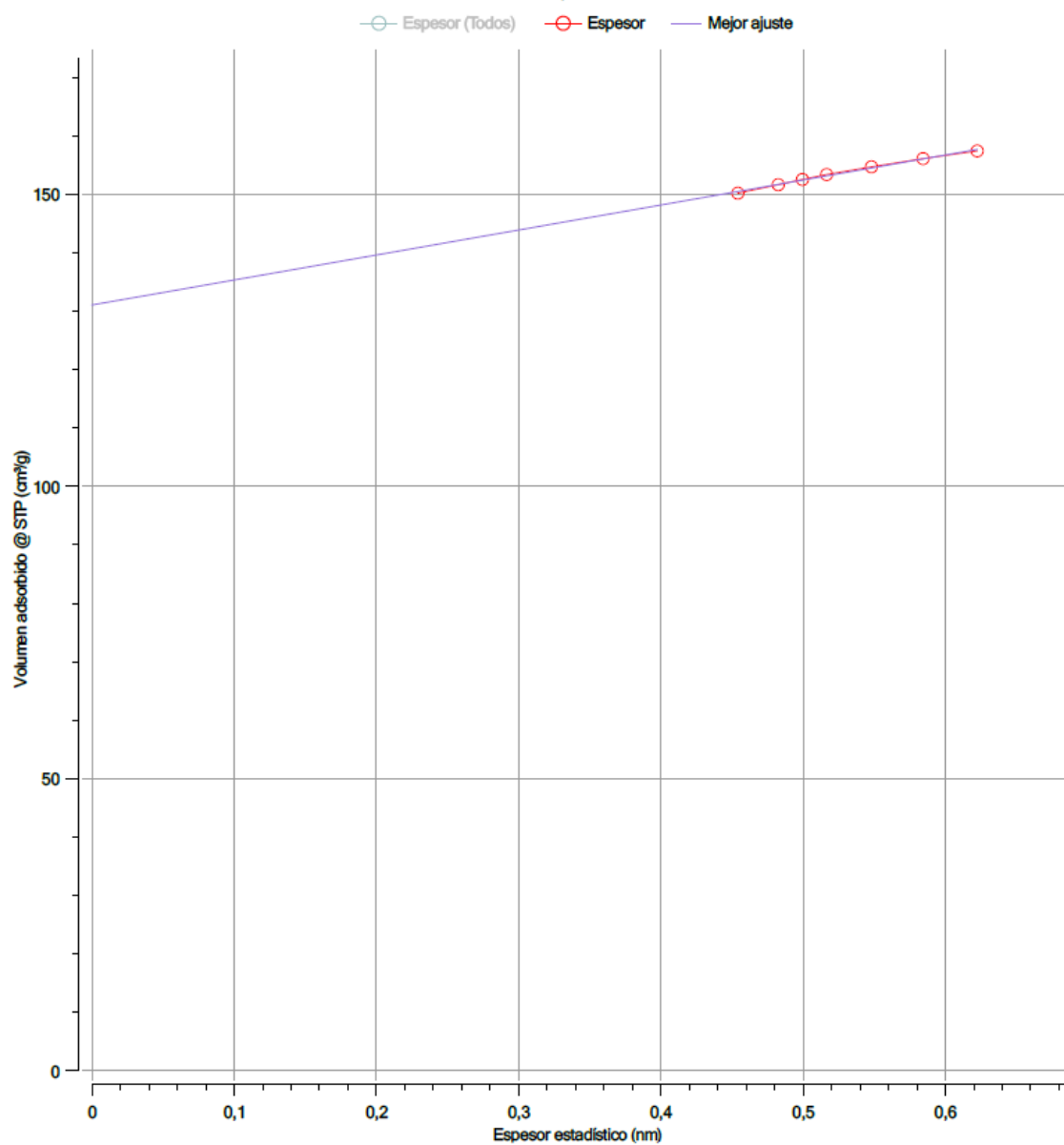


Figura C.2: Análisis *t*-plot del fragmento de pellet monolítico de carbón activado (Diseño 4).

### C.3 Análisis *t*-plot del pellet diseño 5

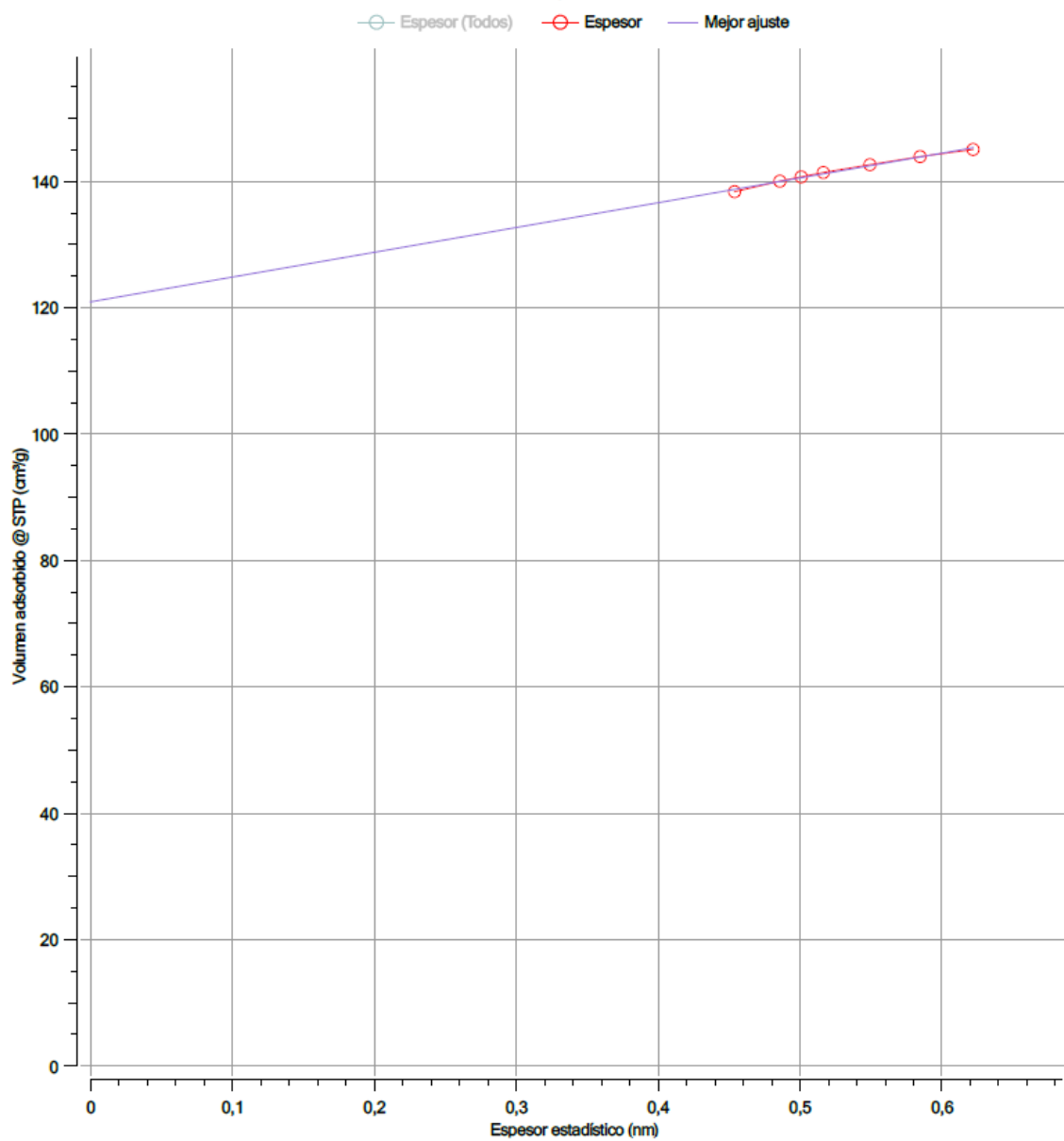


Figura C.3: Análisis *t*-plot del fragmento de pellet monolítico de carbón activado (Diseño 5).

## C.4 Análisis *t*-plot del pellet diseño 6

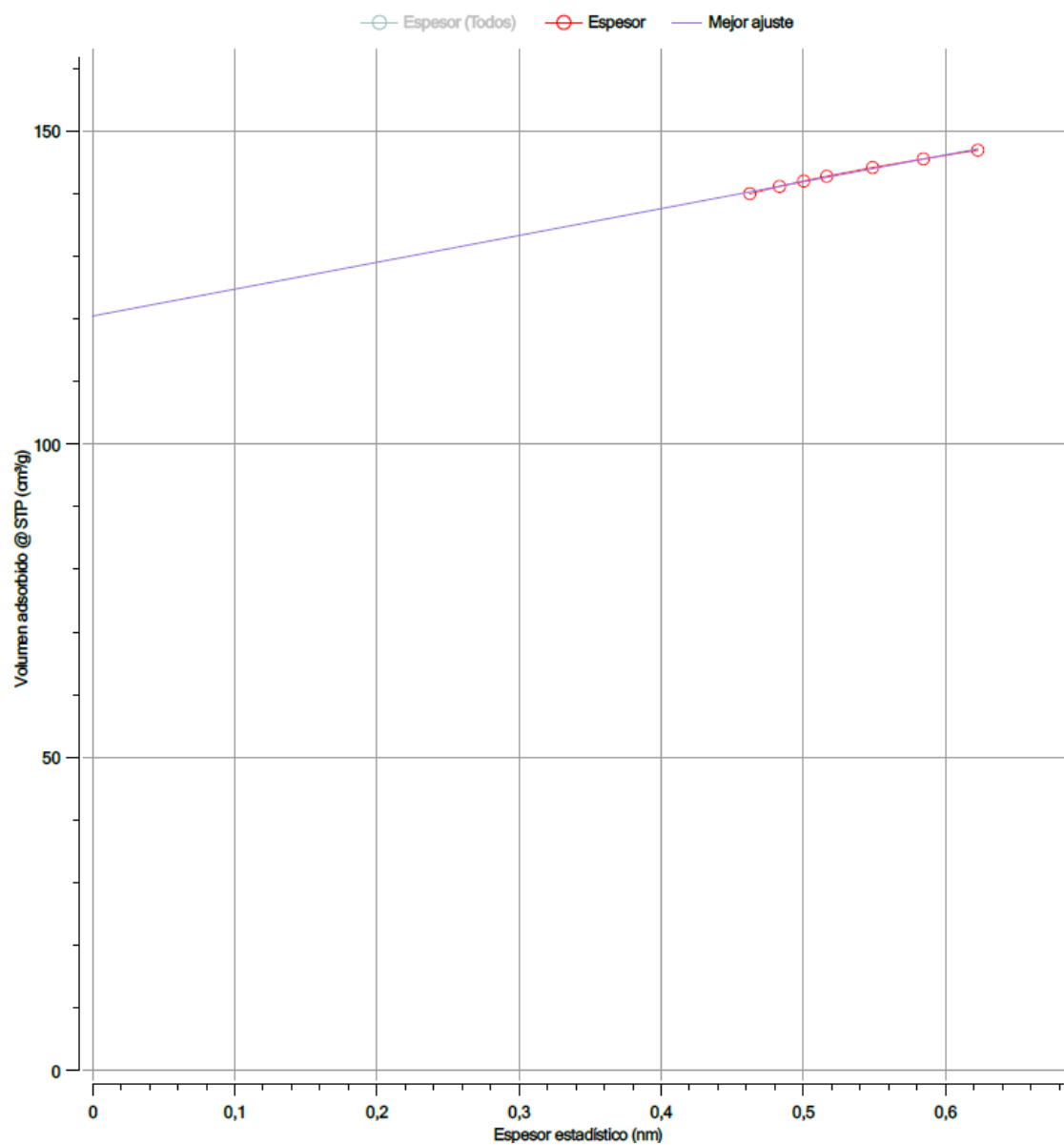


Figura C.4: Análisis *t*-plot del fragmento de pellet monolítico de carbón activado (Diseño 6).

## C.5 Análisis *t*-plot del pellet diseño 4 molido

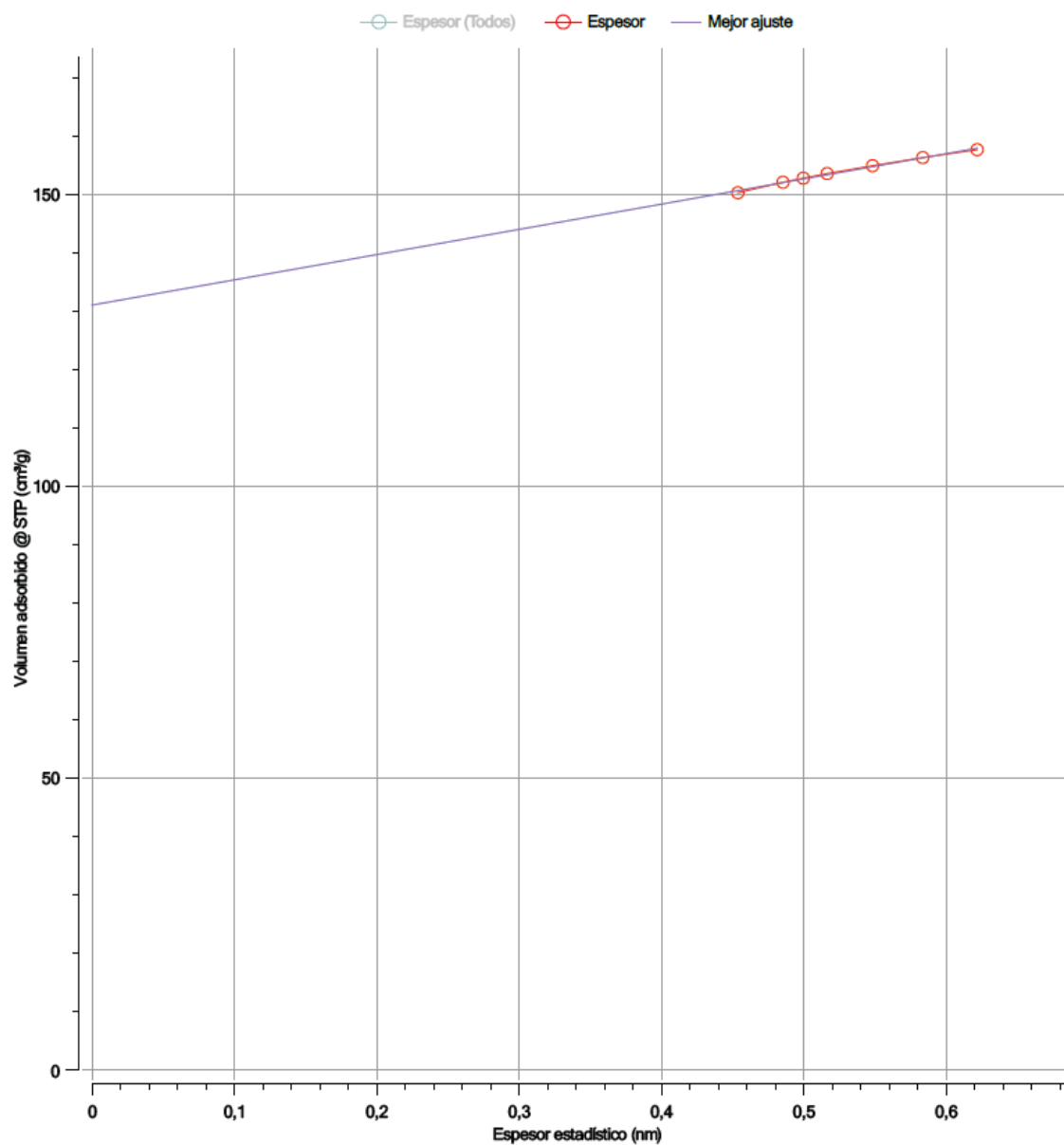


Figura C.5: Análisis *t*-plot del fragmento de pellet monolítico de carbón activado triturado (Diseño 4).

# Apéndice D

## Distribución de tamaño de poro

La distribución de tamaño de poro del carbón activado de cáscara de coco se obtuvo a partir de las isothermas de adsorción–desorción de  $N_2$  a 77 K, utilizando los modelos de análisis implementados por el equipo de caracterización. Dado que la confiabilidad de la distribución de tamaño de poro depende fuertemente de la calidad de la isoterma en el rango de bajas presiones relativas, los resultados aquí presentados deben ser interpretados como indicativos de tendencias generales y no como valores absolutos de referencia. Por esta razón, esta información se incluye como material complementario en el anexo de la presente memoria.

## D.1 Distribución de tamaño de poro del carbón activado en polvo

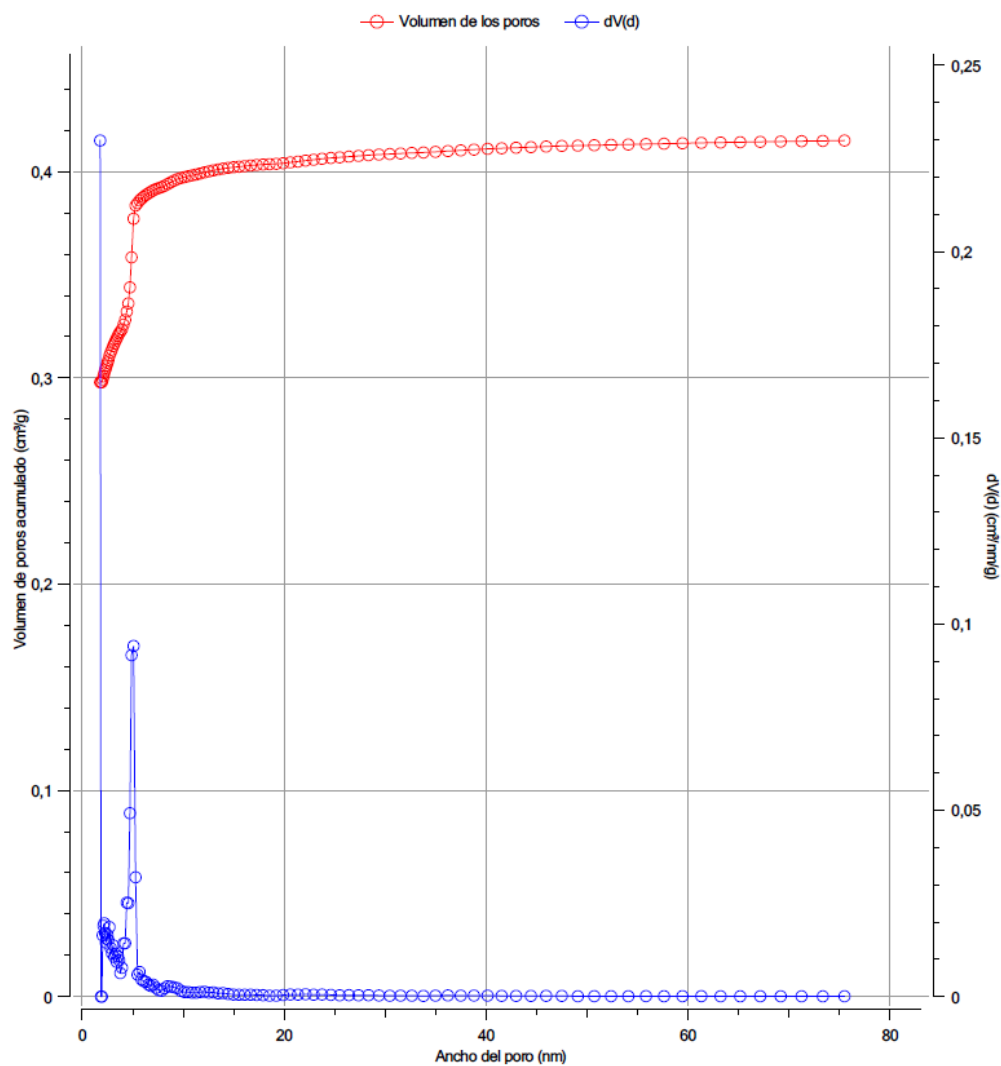


Figura D.1: Distribución de tamaño de poro de la muestra de polvo de carbón activado

## D.2 Distribución de tamaño de poro del del pellet diseño 4

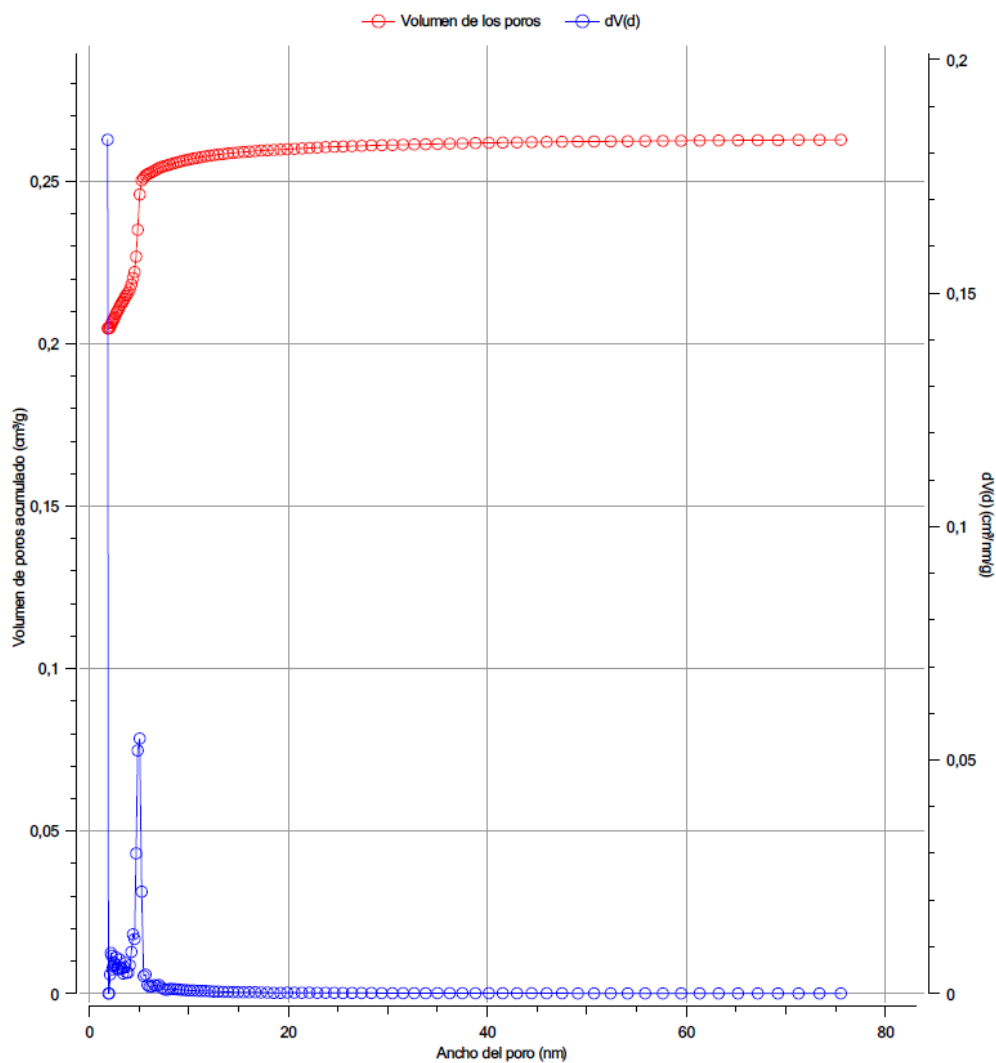


Figura D.2: Distribución de tamaño de poro del fragmento de pellet monolítico de carbón activado (Diseño 4).

### D.3 Distribución de tamaño de poro del del pellet diseño 5

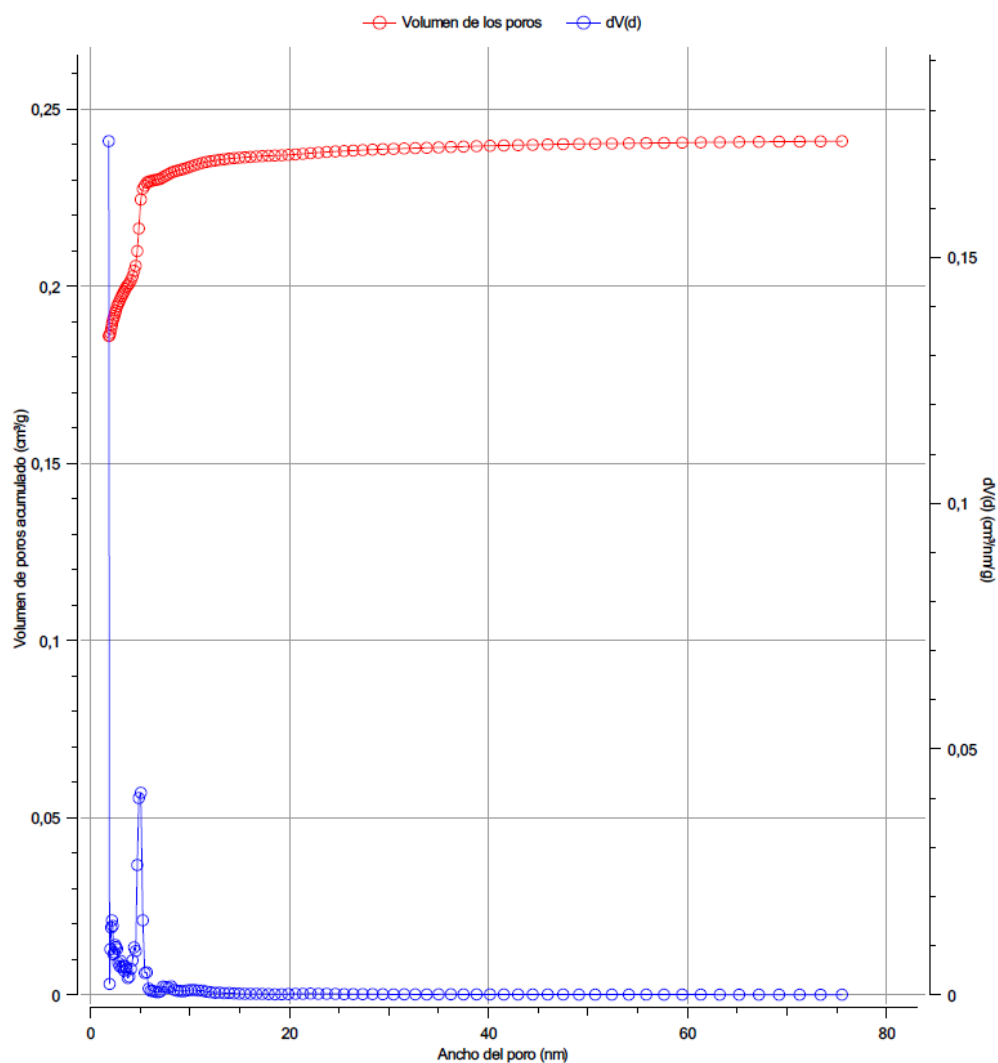


Figura D.3: Distribución de tamaño de poro del fragmento de pellet monolítico de carbón activado (Diseño 5).

## D.4 Distribución de tamaño de poro del del pellet diseño 6

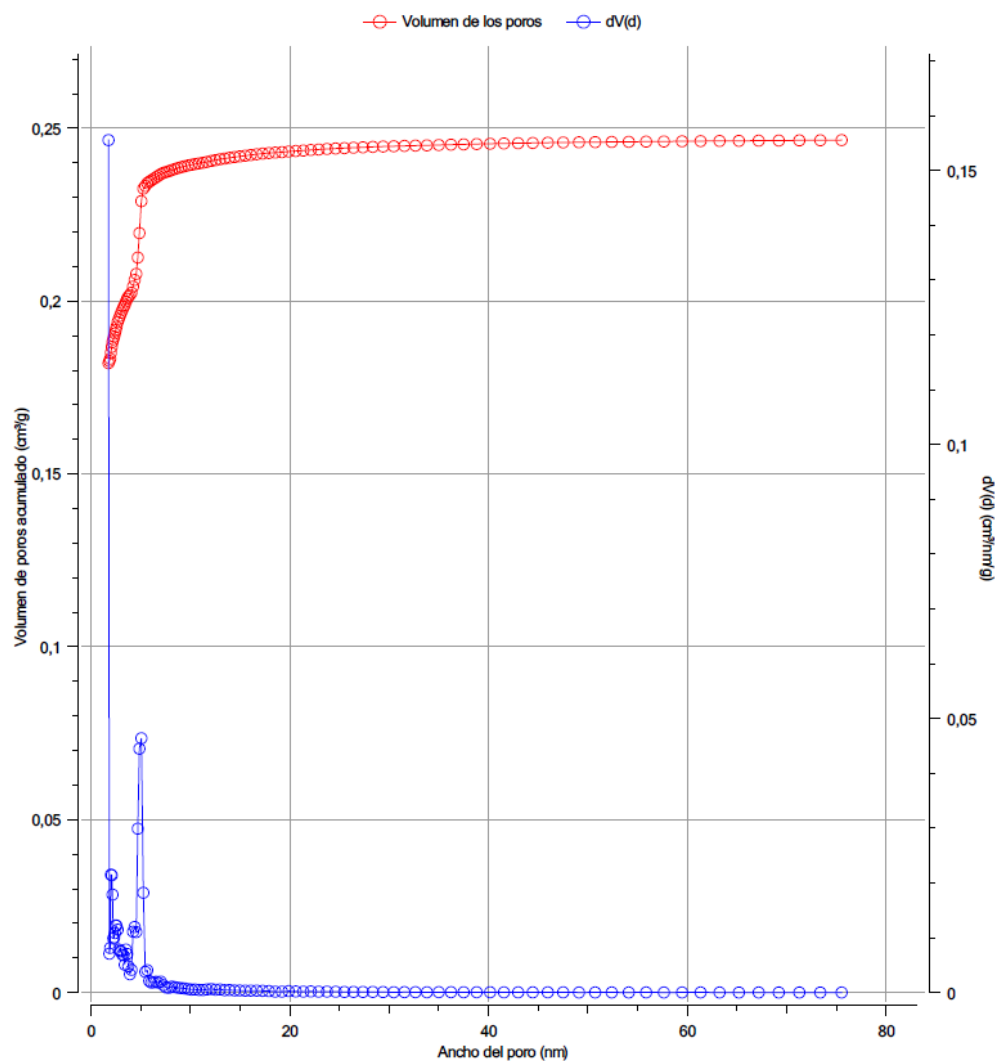


Figura D.4: Distribución de tamaño de poro del fragmento de pellet monolítico de carbón activado (Diseño 6).

## D.5 Distribución de tamaño de poro del del pellet diseño 4 molido

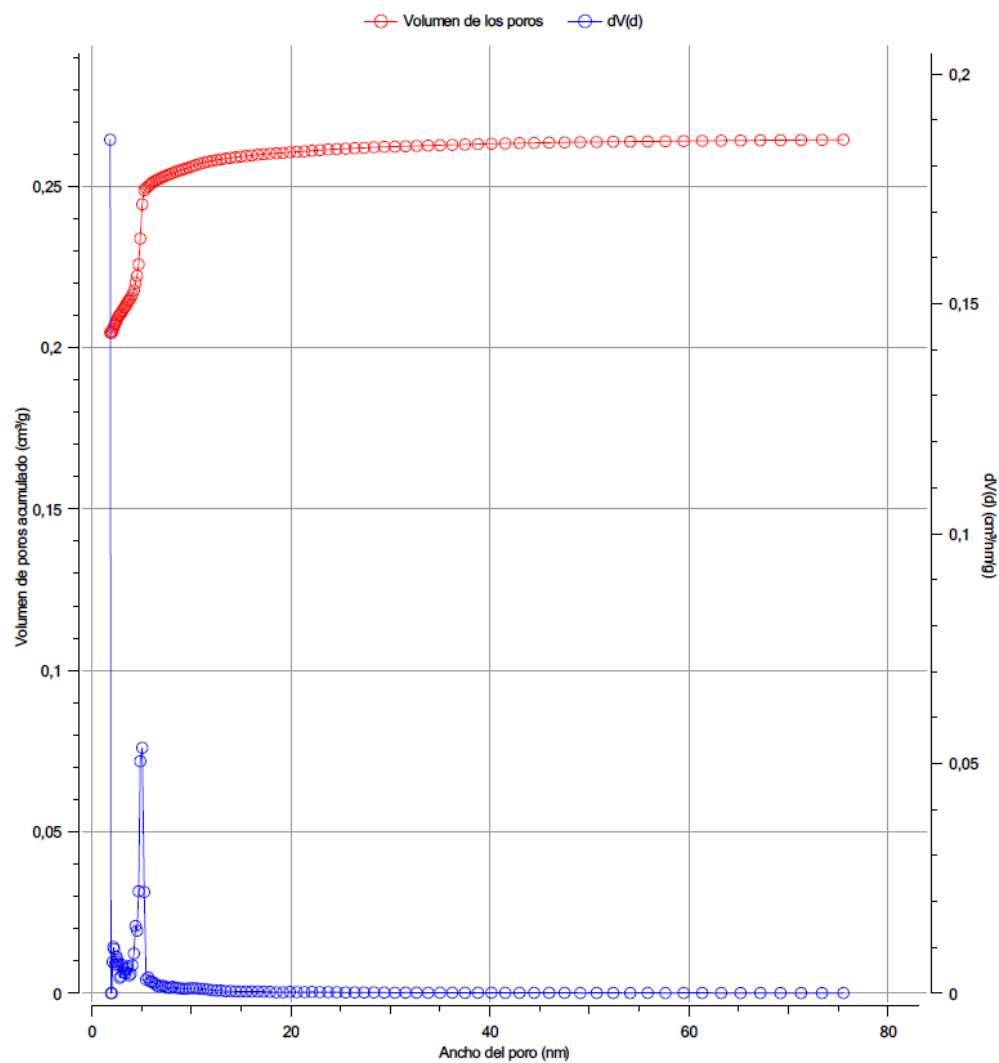


Figura D.5: Distribución de tamaño de poro del pellet monolítico de carbón activado triturado (Diseño 4).