

Trabajo Fin de Máster

Ingeniería Ambiental

Comparación de sistemas de producción de hidrógeno mediante Steam Reforming, electrolizador tipo alcalino y electrolizador tipo PEM

Autor: Lina Juliana Hoyos

Tutor: Bernabé Alonso Fariñas

Dpto. de Ingeniería Química y Ambiental
Escuela Técnica Superior de Ingeniería
Universidad de Sevilla

Sevilla, 2024



Trabajo Fin de Máster
Ingeniería Ambiental

**Comparación de sistemas de producción de
hidrógeno mediante Steam Reforming,
electrolizador tipo alcalino y electrolizador tipo
PEM**

Autor:
Lina Juliana Hoyos

Tutor:
Bernabé Alonso Fariñas
Profesor titular

Dpto. de Ingeniería Química y Ambiental
Escuela Técnica Superior de Ingeniería
Universidad de Sevilla
Sevilla, 2024

Trabajo Fin de Máster: Comparación de sistemas de producción de hidrógeno mediante Steam Reforming, electrolizador tipo alcalino y electrolizador tipo PEM

Autor: Lina Juliana Hoyos

Tutor: Bernabé Alonso Fariñas

El tribunal nombrado para juzgar el Proyecto arriba indicado, compuesto por los siguientes miembros:

Presidente:

Vocales:

Secretario:

Acuerdan otorgarle la calificación de:

Sevilla, 2024

El Secretario del Tribunal

A mi familia
A mis maestros

Agradecimientos

A todas las personas que me han inspirado para llegar hasta aquí. A mi primera maestra, mi madre, por su amor y dedicación. A mi amigo y socio Willi, por su confianza y orientación, siempre a mi lado. A mis amigos, por brindarme la oportunidad de conocerlos y aprender de ellos. A mi amigo de la infancia, Sebas, por su amistad incondicional y constante apoyo. A mi tutor, por sus valiosos consejos y su dedicación al proceso de enseñanza en cada detalle.

A Leidy que, con su apoyo constante y aliento, hizo posible que este proyecto se materializara. Su presencia y respaldo, invaluable.

A Dios por guiarme en este camino, dándome fuerza, sabiduría y perseverancia para alcanzar esta meta.

*Lina Juliana Hoyos
Sevilla, 2024*

Este trabajo compara la producción de hidrógeno gris (reformado de gas natural) con la producción de hidrógeno verde (electrólisis del agua), modelando sistemas a una escala representativa de una economía de hidrógeno, para evaluar la viabilidad y el impacto ambiental de la transición a gran escala. Se ha seguido la metodología ISO 14044 siguiendo el flujo iterativo definición de objetivo y alcance, análisis de inventario evaluación de impacto e interpretación. Se usó software simapro y base de datos Ecoinvent 3.10. La unidad funcional seleccionada ha sido 1 kg de H₂ en puerta de planta en condiciones aptas para el transporte y con características para ser usado en celdas de combustible. Se asumió una contribución marginal de los bienes de capital al impacto ambiental global, centrando el análisis en la fase de uso/operación de las instalaciones para la producción de hidrógeno. Sin embargo, para los electrolizadores, se incluyó la fase de fabricación, considerando el impacto de los metales preciosos y catalizadores, especialmente en los dispositivos PEM (Proton Exchange Membrane).

Los resultados muestran que la tecnología PEM tiene los menores impactos en las categorías de calentamiento global, ecotoxicidad y consumo de agua, destacándose por su diseño compacto y la eliminación de la etapa de purificación debido a la alta pureza del hidrógeno alcanzada en la celda PEM. Las principales limitaciones enfrentadas se debieron a la calidad de datos en etapas como la compresión, lo cual limitó la precisión de la comparación en esta etapa. Los datos de consumo de agua y energía son especialmente sensibles ya que son determinantes en la mayoría de las categorías de impacto evaluadas, por lo que deberían de tomarse una muestra de datos para una evaluación más rigurosa.

This work compares the production of gray hydrogen (natural gas reforming) with the production of green hydrogen (water electrolysis), modeling systems at a scale representative of a hydrogen economy, to assess the feasibility and environmental impact of the large-scale transition. The methodology ISO 14044 was followed, with an iterative process including goal and scope definition, inventory analysis, impact assessment, and interpretation. The software used was SimaPro, with the Ecoinvent 3.10 database. The selected functional unit was 1 kg of H₂ at the plant gate, in conditions suitable for transportation and with characteristics for use in fuel cells. A marginal contribution of capital goods to the overall environmental impact was assumed, with the analysis focusing on the operation phase of hydrogen production facilities. However, for the electrolyzers, the manufacturing phase was included, considering the impact of precious metals and catalysts, especially in PEM (Proton Exchange Membrane) devices.

The results show that the PEM technology has the lowest impacts in the categories of global warming, ecotoxicity, and water consumption, standing out for its compact design and the elimination of the purification stage due to the high hydrogen purity achieved in the PEM cell. The main limitations faced were due to data quality in stages such as compression, which limited the accuracy of the comparison at this stage. Water and energy consumption data are especially sensitive, as they are decisive in most of the evaluated impact categories, and thus, a data sample should be taken for a more rigorous assessment.

Agradecimientos	ix
Resumen	xi
Abstract	xiii
Índice	xv
Índice de Tablas	xvii
Índice de Figuras	xviii
Notación	xx
1 Introducción	1
2 Objetivo y alcance	3
2.1 <i>Objetivo</i>	3
2.2 <i>Definición de los sistemas a estudiar</i>	3
2.2.1 Definición sistema de reformado de metano con vapor	3
2.2.2 Definición sistema electrólisis	4
2.3 <i>Función del sistema</i>	4
2.4 <i>Límites del Sistema</i>	5
2.4.1 Reformado de metano con vapor	6
2.4.2 Electrólisis	6
2.5 <i>Descripción de los sistemas</i>	8
2.5.1 Reformado de metano con vapor o <i>Steam methane reforming</i> (SMR)	8
2.5.2 Electrólisis Alcalina	17
2.5.3 Electrólisis de intercambio de protones	26
2.6 <i>FIN DE VIDA</i>	33
2.7 <i>Procedimiento de asignación</i>	35
2.8 <i>Categorías de impacto y metodología de evaluación</i>	35
2.8.1 Potencial de calentamiento global	36
2.8.2 Radiación ionizante	36
2.8.3 Potencial de Eutrofización	36
2.8.4 Uso del suelo	36
2.8.5 Ecotoxicidad y potencia de toxicidad humana	36
2.8.6 Uso del agua	37
2.8.7 Agotamiento de recursos abióticos	37
2.9 <i>Requisitos relativos a los datos</i>	37
2.10 <i>Suposiciones y Limitaciones</i>	38
3 Análisis del inventario	40
3.1 <i>Reformado con vapor</i>	40
3.1.1 Suposiciones	41
3.1.2 Limitaciones	42
3.1.3 Cálculos	42
3.2 <i>Electrólisis Alcalina</i>	48
3.2.1 Suposiciones	49
3.2.2 Limitaciones	50

3.2.3	Cálculos	50
3.3	<i>Electrólisis PEM</i>	53
3.3.1	Suposiciones	55
3.3.2	Limitaciones	55
3.3.3	Cálculos	56
4	Evaluación del Impacto	59
4.1	<i>Selección de categorías de impacto</i>	59
4.2	<i>Metodología de evaluación del impacto</i>	60
4.3	<i>Resultados de caracterización en SimaPro</i>	61
5	Interpretación del ACV	63
5.1	<i>Análisis de los asuntos significativos</i>	63
5.1.1	Análisis por categorías de impacto	63
5.2	<i>Evaluación de resultados por etapas de producción o uso</i>	65
5.2.1	Calentamiento Global GW	65
5.2.2	Ecotoxicidad Terrestre	65
5.2.3	Radiación ionizante	65
5.2.4	Toxicidad humana carcinogénica	66
5.2.5	Escasez de recursos minerales	66
5.2.6	Consumo de agua	66
5.3	<i>Conclusiones, limitaciones y recomendaciones</i>	68
5.3.1	Conclusiones	68
5.3.2	Limitaciones	68
5.3.3	Recomendaciones	68
	Referencias	70
	ANEXOS	I
	<i>ANEXO A. CÁLCULOS</i>	<i>I</i>
	Cálculos adicionales reformado	I
	Cálculos adicionales electrólisis alcalina	III
	Cálculos adicionales Electrólisis PEM	V
	<i>ANEXO B. INVENTARIOS</i>	<i>vii</i>

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 2-1. Matriz de indicadores de calidad de datos (DQI)	38
Tabla 2-2. Ponderación de indicadores de calidad de datos (DQI)	38
Tabla 3-1. Balance de materia Reformado	43
Tabla 3-2. Recursos fabricación de catalizador de NiO (Agarski et al., 2017).....	44
Tabla 3-3. Modelado de proceso de recuperación de níquel.....	44
Tabla 3-4. Caudal másico gases residuales/uf del PSA.	45
Tabla 3-5. Balance de masa en el WGS	45
Tabla 3-6. Fabricación catalizador de óxido de hierro.....	45
Tabla 3-7. Entradas catalizador de Hierro.....	46
Tabla 3-8. Modelo catalizador de Cobre y Zinc.....	46
Tabla 3-9. Fabricación de catalizador de cobre y zinc (Li et al., 2017).....	46
Tabla 3-10. Especificaciones stacks Alcalinos (Krishnan et al., 2024)	48
Tabla 3-11 Inventario BoP electrolizador Alcalino de 100 MW.	49
Tabla 3-12. Especificaciones compresor.....	50
Tabla 3-13. Composición del stack Alcalino	50
Tabla 3-14. Materiales BoP electrolizador Alcalino.....	51
Tabla 3-15. Resumen de entradas Electrólisis (Uso)	51
Tabla 3-16. Entradas y salidas para el proceso de purificación	52
Tabla 3-17. Parámetros generales planta electrólisis 10 MW.....	53
Tabla 3-18. Especificaciones de diseño para electrolizador PEM de 1 MW	53
Tabla 3-19. Resumen componentes de un stack en un electrolizador tipo PEM	54
Tabla 3-20. Especificaciones compresor.....	55
Tabla 3-21. Materiales Celda PEM	56
Tabla 3-22. Especificaciones plato final para integrar stacks	57
Tabla 3-23. Materiales principales asumidos para BOP.	57
Tabla 3-24. Entradas proceso de electrólisis PEM.....	58
Tabla 4-1. Evaluación de las Categorías de Impacto	60
Tabla 4-2. Resultados totales de la comparativa	61
Tabla 4-3. Resultados desglosados por etapa.....	61
Tabla 5-1. Comparación del impacto ambiental usando escala de valores.....	68

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 2-1. Límites del sistema, de la puerta a la puerta	5
Figura 2-2. Alcance del modelo	5
Figura 2-3. Límites del sistema para la producción de Hidrógeno por reformado	6
Figura 2-4 Límites del sistema para la producción de Hidrógeno por electrólisis	6
Figura 2-5. Electrolizador contenerizado.....	7
Figura 2-6. Balance de materia y energía pretratamiento de gas natural	8
Figura 2-7 Diagrama de entradas y salidas Pretratamiento de gas natural	9
Figura 2-8. Esquema Reformado de gas natural	9
Figura 2-9. Fabricación catalizar basado en níquel.....	10
Figura 2-10. Proceso de reciclado de catalizador NiO.....	10
Figura 2-11. Recuperación de níquel del catalizador de reformado	11
Figura 2-12. Diagrama del proceso reformado	11
Figura 2-13. Catalizador de óxido de hierro	12
Figura 2-14. Catalizador de cobre y zinc	12
Figura 2-15. Diagrama del proceso WGS	13
Figura 2-16. Absorción post-combustión del CO ₂	13
Figura 2-17. Captura del CO ₂ postcombustión	13
Figura 2-18. Esquema del proceso PSA.....	14
Figura 2-19. Diagrama del proceso de separación y purificación.....	15
Figura 2-20. Diagrama Compresión para almacenamiento en tanques	16
Figura 2-21. Diagrama de procesos hidrógeno producido por SMR/CCS	16
Figura 2-22. Ilustración celda electrólisis alcalina.....	17
Figura 2-23. Ensamble de celdas en un ensamble alcalino	18
Figura 2-24. Diagrama fabricación de celdas y stacks alcalinos	19
Figura 2-25. Esquema de balance de planta electrolizador alcalino	20
Figura 2-26. Construcción de electrolizador Alcalino	20
Figura 2-27. Configuración de un módulo bipolar	21
Figura 2-28. Electrólisis alcalina	23
Figura 2-29. Secador VPS sin calor de purga al vacío.....	24
Figura 2-30. Purificación de hidrógeno	24
Figura 2-31. Compresión de hidrógeno	25
Figura 2-32. Diagrama de procesos hidrógeno producido por electrólisis Alcalina.....	25
Figura 2-33. Celda electrólisis PEM	26
Figura 2-34. Configuración de una celda PEM, elaboración propia.....	27
Figura 2-35. Conjunto membrana catalizadores (MEA).....	27
Figura 2-36. Estructura química de la membrana PEM.....	28
Figura 2-37. Preparación de membrana MEA por método CCM.....	29
Figura 2-38. Producción de PTL para el ánodo PEM	29
Figura 2-39. Estructura del stack PEM	31
Figura 2-40. Esquema de balance de planta PEM	31
Figura 2-41. Construcción de electrolizador PEM.....	32
Figura 2-42. Compresión de H ₂ desde 30 bar a 200 bar en compresor de pistón	33
Figura 2-43. Procesos de Fin de Vida, Electrólisis	34
Figura 2-44. Recuperación de PGM o Ni de celdas de electrólisis.....	34
Figura 2-45. Diagrama de procesos hidrógeno producido por electrólisis PEM	35
Figura 5-1. Contribución a categorías de impacto de cada tecnología	63
Figura 5-2. Gráfica de radar de valores normalizados por tecnología	64

Figura 5-3. Impactos distribuidos por etapas de conversión, purificación y compresión.....	65
Figura 5-4. Evaluación de categorías de impacto por etapas para SMR.....	67
Figura 5-5. Evaluación de categorías de impacto por etapas para electrolizadores ALK.....	67
Figura 5-6. Evaluación de categorías de impacto por etapas para electrolizadores PEM.....	67

Notación

A	Amperes
ACV	Análisis de Ciclo de Vida
AE	Electrolito Alcalino
ALK	Electrolizador Alcalino
AP	Potencial de Acidificación
Au	Oro
BOP	Balance de Planta
BPP	Placa Bipolar
BPs	Placas Bipolares
CA	Corriente Alterna
CC	Corriente Continua
CMS	Tamices Moleculares de Carbón
DQI	Indicadores de Calidad de Datos
EP	Potencial de Eutrofización
GW	Calentamiento global
GWP	Potencial de Calentamiento Global
HER	Evolución de la Reacción de Hidrógeno
HHV	Poder Calorífico Superior
J	Joules
KOH	Hidróxido de Potasio
MEA	Conjunto de electrodo-membrana
MEA	Monoetanolamina
N	Número
OER	Evolución de la Reacción de Oxígeno
P	Potencia
PCS	Poder calorífico superior
PED	Demanda de Energía Primaria
PEM	Electrolizadores de membrana polimérica
PFSA	Ácido polisulfónico
PGMs	Materiales del Grupo del Platino
POCP	Potencial de Creación de Ozono Fotoquímico
PSA	Unidad de Adsorción de Oscilación a Presión
PSU	Unidad de suministro de Potencia
Pt	Platino
PTL	Capa Porosa de Transporte
PVD	Deposición física de vapor

SMR	Reformado de Metano con Vapor
SPE	Electrolito Polimérico Sólido
V	Voltios
VPS	Pulverización de vacío por plasma
WGS	Reacción de Desplazamiento de Agua-gas

1 INTRODUCCIÓN

"La tecnología es una herramienta poderosa que puede cambiar el mundo, pero solo si se desarrolla y se utiliza de manera responsable y ética.
- Tim Cook -

En diversos círculos académicos y empresariales hay escepticismo en torno a la viabilidad de la transición energética, así como al rol del hidrógeno como vector energético en la meta de alcanzar la descarbonización completa del sector energético español para el año 2050.

A pesar de que el concepto de transición energética ha resonado durante décadas, comenzó a crecer en las discusiones políticas y científicas junto con la urgencia de menguar el cambio climático. En 2015 con la firma del Acuerdo de París, las naciones del mundo se comprometieron a reducir las emisiones con el objetivo de limitar el aumento de la temperatura global. El Gobierno de España ha adoptado una posición proactiva al apostar por el hidrógeno renovable como componente crucial en la estrategia de transición energética hacia la descarbonización de la economía en 2050. El hidrógeno, como vector energético, puede la electricidad excedentaria de fuentes renovables, lo que posibilita una mayor penetración de energías limpias en el sistema eléctrico.

La hoja de ruta trazada para el hidrógeno establece tres hitos a alcanzar en el horizonte temporal hasta 2050 (MITERD, 2020):

- En la primera fase (2020-2024), se previó la instalación de al menos 6 GW de electrolizadores en la Unión Europea, junto con la producción de 1 millón de toneladas de hidrógeno renovable.
- En la segunda fase (2025-2030), se plantea la instalación de al menos 40 GW de electrolizadores para 2030, con una producción proyectada de hasta 10 millones de toneladas de hidrógeno renovable en la Unión Europea.
- La tercera fase (2030-2050) está destinada a la madurez y al despliegue a gran escala de las tecnologías de hidrógeno renovable.

En este contexto de transformación tecnológica y cambio de paradigma, es notable que actualmente el 99% del hidrógeno consumido en España se obtiene a través del reformado de gas natural (SMR), lo que se conoce como hidrógeno gris o azul (cuando se integra con captura de CO₂). Con esta premisa, el propósito fundamental de este trabajo radica en efectuar una comparación mediante un análisis de ciclo de vida, entre la producción de hidrógeno a través de la electrólisis del agua empleando los dos tipos predominantes de electrolizadores hasta la fecha (de membranas de intercambio de protones y Alcalinos), y la producción de hidrógeno mediante el reformado de gas natural.

El objetivo primordial de este análisis reside en la identificación de etapas clave con un impacto sustancial, no solo en términos de emisiones de gases de efecto invernadero, sino también en aspectos cruciales como el consumo de agua, la escasez de recursos. Estos aspectos han sido hitos recurrentes en el análisis del impacto ambiental de las fuentes de energía renovable. En consecuencia, se busca que este estudio sirva como guía informada a investigadores, y público general al proporcionar una comprensión más profunda de las implicaciones ambientales en el desarrollo y la expansión de tecnologías que promuevan un futuro impulsado por el hidrógeno verde.

Este análisis seguirá la metodología establecida por las normas ISO 14040/14044 para el análisis de ciclo de vida de productos, que comprenden la definición de objetivos y alcance, el análisis de inventario, la evaluación de impactos y la interpretación de resultados.

2 OBJETIVO Y ALCANCE

En este capítulo, se delinea el objetivo y alcance específico del análisis de ciclo de vida comparativo para la producción de hidrógeno a través de tres vías distintas: el reformado con vapor (SMR), electrolizadores alcalinos (ALK) y los electrolizadores de membrana de intercambio de protones (PEM, por sus siglas en inglés). Desglosando los requisitos de la Norma ISO 14044.

2.1 Objetivo

El objetivo de este análisis de ciclo de vida es evaluar el impacto ambiental de dos sistemas de producción de hidrógeno: las tecnologías de electrolizadores más prometedoras (Delpierre et al., 2021), de membrana de electrolito polimérico (PEM) y de electrolito alcalino (AE), en su estado actual de desarrollo, en comparación con el método de producción predominante en el mundo para generar hidrógeno, el reformado con vapor (IEA, 2022).

El estudio se llevará a cabo siguiendo las directrices de las normas ISO 14040 y 14044, y el documento guía para el desarrollo de Análisis de Ciclo de Vida (ACV) en sistemas de producción de hidrógeno (Lozanovski et al., 2011).

El propósito del estudio será:

- Evaluar categorías de impacto clave, como el consumo de agua, utilizando la información más actualizada disponible para hacer una comparación específica de los sistemas de producción de hidrógeno más competitivos.
- Contribuir al estado del arte de evaluación de impacto ambiental en la producción de hidrógeno considerando categorías de impacto interés general como el agotamiento de recursos en el desarrollo responsable de la tecnología (Köhler, 2013).

Está orientado tanto a investigadores, así como al público en general interesado en la producción de hidrógeno y su impacto ambiental.

2.2 Definición de los sistemas a estudiar

Según IRENA al final de 2021, casi el 47% de la producción global de hidrógeno provino de gas natural, 27% de carbón, 22% como subproducto de la industria del refino, y únicamente 4% de la electrólisis (IRENA, 2023). En este estudio, compararemos el reformado de metano con vapor y los sistemas de electrólisis de membrana de intercambio de protones y alcalinos, como procesos de producción de hidrógeno para su uso en celdas de combustible.

2.2.1 Definición sistema de reformado de metano con vapor

La producción de hidrógeno se realiza en un reactor conocido como reformador. El reformado de gas natural es la descomposición de la molécula de metano para dar lugar a hidrógeno y óxidos de carbono (CO y CO₂). Para que tenga lugar este proceso se requiere la combinación de tres condiciones: alta temperatura (700-1.100 °C), presencia de un catalizador (en base níquel), y presencia de un agente oxidante (agua y/o aire) (Guilera et al., 2020).

Antes del reformado, el gas natural debe ser pretratado para remover compuestos de azufre los cuales son altamente corrosivos y pueden envenenar los catalizadores utilizados en el reformado. Además, el proceso de reformado suele seguirse con dos etapas de desplazamiento de agua-gas (WGS, por sus siglas en inglés) para obtener una mayor cantidad de hidrógeno y dióxido de carbono (Ferraces Azcunaga & López Gestoso, 2016).

Para obtener una corriente de hidrógeno puro primero debe separarse el CO₂ por un proceso de absorción con amina y una etapa final de purificación, en la que el hidrógeno se separa de los otros componentes con una unidad adsorción con presión oscilante (PSA) que utiliza tamices moleculares como material absorbente.

2.2.2 Definición sistema electrólisis

La energía procedente de fuentes renovables se usa para separar la molécula de agua en H₂ y O₂, mediante un proceso electrolítico, para esto se emplea un electrolizador que es un sistema que consta de celdas electrolíticas organizadas en *módulos* en los que se da lugar a la reacción (2-1).



En el módulo las celdas están conectadas en serie y fluye la misma corriente a través de todas, cada electrodo, excepto el inicial y el final, tiene dos polaridades, positiva y negativa, con respecto a la celda a la que pertenezca. Esta configuración es llamada bipolar, y el módulo es también conocido como *stack*. Cada electrodo bipolar consiste en dos electrodos, ánodo (+) y cátodo (-), físicamente unidos por un colector de corriente, tamiz de alambre o platos de materiales como grafito o acero inoxidable. El voltaje del módulo V_m es igual a la suma de los voltajes de las celdas conectadas en serie y la corriente del módulo es igual a la corriente de las celdas I_m=I_{celda}. El mantenimiento de configuraciones bipolares consiste en el reemplazo completo del módulo y no suelen requerir mantenimiento continuo ya que la mayoría de sus partes no son móviles. La mayoría de los fabricantes producen módulos bipolares básicos y configuran varios de estos en un electrolizador para alcanzar la tasa de producción deseada (Ursúa et al., 2011).

Una planta de producción de hidrógeno por electrólisis requiere equipamiento adicional a los electrolizadores, este equipamiento se conoce como balance de planta (BoP), e incluye dispositivos de refrigeración, compresión de hidrógeno, suministro y tratamiento de agua, suministro de electricidad entre otros (Matute Gomez et al., 2022).

Para aumentar la eficiencia del proceso, se suelen agregar electrolitos a las celdas, dando distintos tipos de electrolizadores como de membrana polimérica (PEM) o de electrolito alcalino (ALK). El hidrógeno producido por la electrólisis alcalina requiere un paso adicional de purificación para alcanzar condiciones equivalentes. La purificación mediante PSA es de lo más común por su capacidad para manejar grandes volúmenes de gas y su eficacia llevando la pureza hasta 99,99% (Gasin, n.d.).

El oxígeno generalmente es venteadado a la atmósfera, y el hidrógeno puede producirse a presiones bajas o altas según el electrolito, los sistemas grandes utilizan sistemas de enfriamiento a base de agua purificada.

2.3 Función del sistema

Producir 1 kg de hidrógeno en puerta de planta, a presión de almacenamiento en el punto de producción, con características de calidad para ser usado como combustible en celdas, es decir con pureza ≥ 99,97% (ISO 14687, 2019) a presión de 200 bar y temperatura 25°C, estas últimas ideales para el transporte y distribución y que corresponden a los sistemas armonizados para medir el impacto ambiental del hidrógeno verde (Valente et al., 2017).

2.4 Límites del Sistema

El modelo de Análisis de Ciclo de Vida (ACV) se subdivide en varias capas (Gerhardt-Mörsdorf et al., 2024). La capa más alta comprende las tres fases del ciclo de vida: construcción, uso y fin de vida (EoL). La construcción no se contempla dentro del alcance del sistema y el fin de vida se considera únicamente para los catalizadores Raney basados en níquel por su peligrosidad. El uso de las instalaciones para producir hidrógeno estará completamente incluido en un alcance de la puerta a la puerta (Figura 2-1, adaptada de mundocompresor.com, 2022).

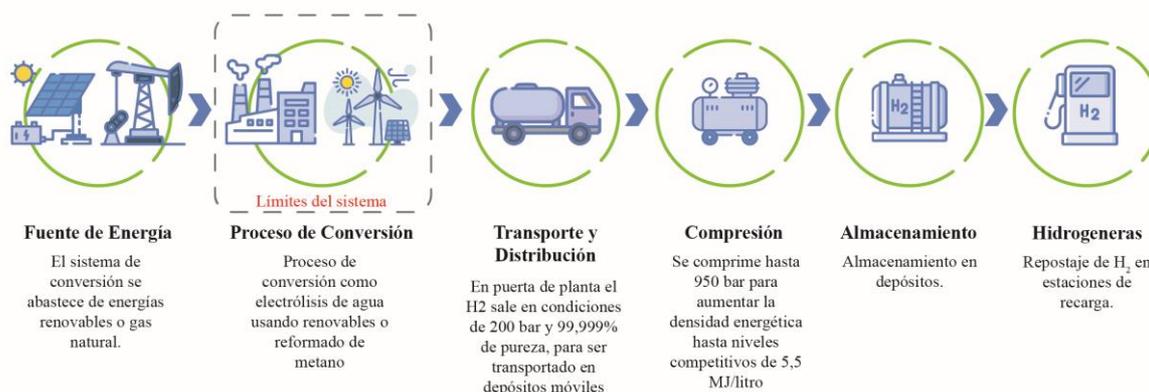


Figura 2-1. Límites del sistema, de la puerta a la puerta

En la producción de hidrógeno o uso, se tendrán en cuenta las etapas de conversión, purificación y acondicionamiento para su almacenamiento. Como se observa en la Figura 2-2, la conversión es lo que diferencia los 3 sistemas a estudiar, mientras que purificación y acondicionamiento son similares, pero con diferentes necesidades dadas las diferencias de pureza y presión al culminar la etapa de conversión. La purificación es necesaria para que el hidrógeno alcance las especificaciones para ser usado en celdas de combustible.

El hidrógeno destinado al transporte y uso en celdas de combustible se almacena comúnmente a presiones de 200 bar para asegurar un transporte seguro en depósitos móviles (mundocompresor.com, 2022).

El almacenamiento en planta se realiza en el mismo tipo de tanques tanto en reformado como en electrólisis siendo directamente proporcional el número de tanques a la producción de hidrógeno, por lo que la fabricación de tanques para el almacenamiento estacionario se deja fuera del sistema (Addcomposites, 2024).

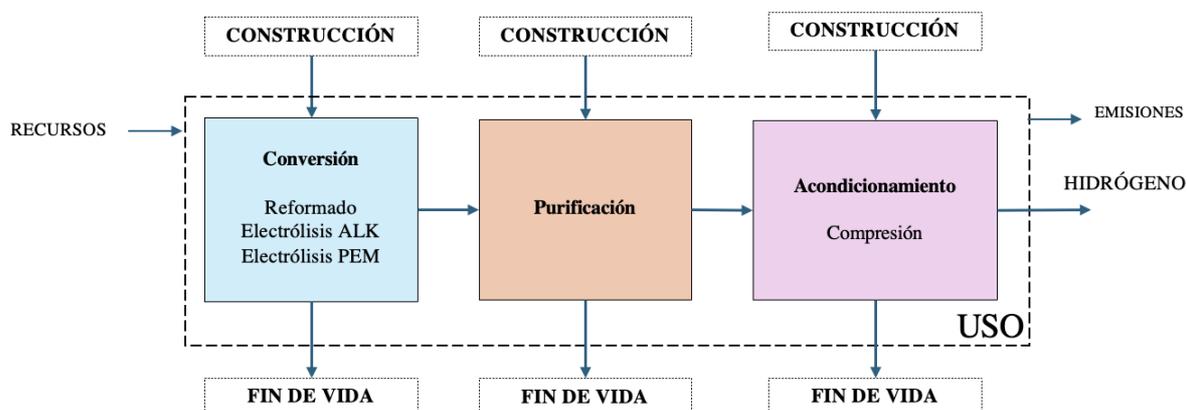


Figura 2-2. Alcance del modelo

2.4.1 Reformado de metano con vapor

De la puerta a la puerta. La construcción de la planta no se considera dentro de los límites del sistema, ya que, de acuerdo con los estudios de análisis de ciclo de vida realizados por (Wilkinson et al., 2023) el impacto de los bienes capitales es considerado despreciable debido a la amplia vida útil de las instalaciones industriales.

El proceso de conversión incluye el pretratamiento del gas natural, la reacción de desplazamiento para enriquecer la corriente de salida en hidrógeno y la separación del CO₂ del hidrógeno por un proceso de captura de CO₂ precombustión (hidrógeno azul) (Guilera et al., 2020).

Los procesos de fin de vida que forman parte del desmantelamiento de la planta no se incluyen por falta de datos. La conversión comprende los procesos mostrados en la Figura 2-3 (dentro de la línea discontinua).

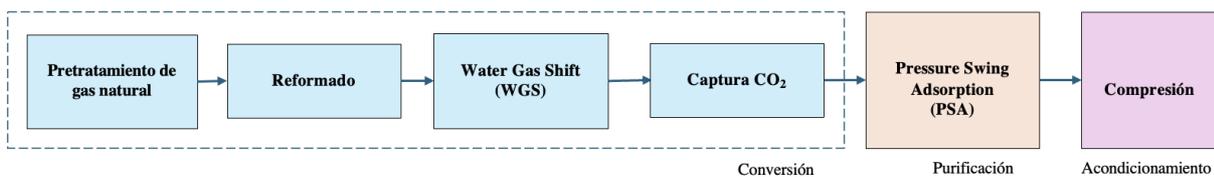


Figura 2-3. Límites del sistema para la producción de Hidrógeno por reformado

La compresión hasta 200 bar se realiza en una etapa desde la presión de salida de la unidad PSA. Durante la compresión se genera calor que hay que disipar, mediante un sistema de refrigeración que permite reducir a valores inferiores a 40°C.

2.4.2 Electrólisis

De la puerta a la puerta. La electrólisis se produce en las celdas, estas se integran en stacks y estas junto con el BoP conforman el electrolizador (Figura 2-4).

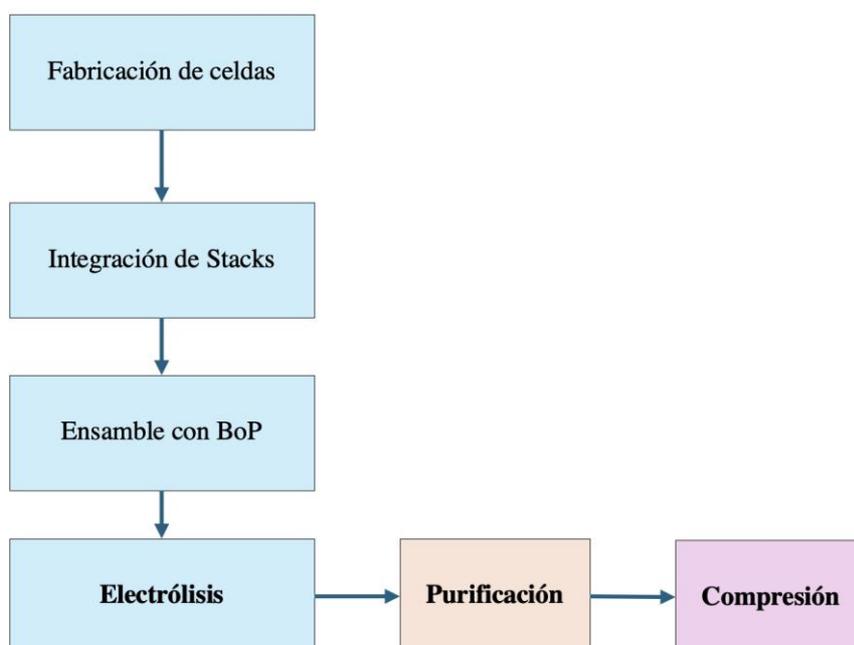


Figura 2-4 Límites del sistema para la producción de Hidrógeno por electrólisis

No se tienen en cuenta la construcción de las plantas de suministro de energía renovable que suministran energía al electrolizador, ya que por ejemplo, según la hoja de ruta de hidrógeno

(MITERD, 2020), la producción de hidrógeno con electrolizadores se usaría para aprovechar la energía renovable excedentaria generada en las horas de menor consumo eléctrico, funcionando como almacenamiento de energía; Además según un estudio (Pehl et al., 2017), se espera que su impacto ambiental disminuya gracias al progreso tecnológico y la descarbonización de la producción de materiales y energía en la cadena de suministro, tales como aluminio, clinker, cobre y acero, que aseguran que el costo energético de construir y operar plantas de energía, será del 3 al 8% de la producción de electricidad en 2050 para tecnologías nucleares, eólicas y solares.

Ensamble con el BoP se refiere a integrar los stacks con todos los elementos requeridos para operar a las condiciones de temperatura y presión necesarias para producir hidrógeno, incluye intercambiadores de calor, separadores, bombas, suministro de agua desionizada, circuito de refrigeración. El sistema completo con la electrónica de potencia (rectificador y transformador), y la electrónica de control, se integran junto con el electrolizador contenerizado (Figura 2-5) (PEM Electrolyzer ME450: H-TEC SYSTEMS Products, n.d.)

Sobre el BoP no hay datos disponibles del diseño por los fabricantes, sin embargo, estudios de literatura (BareiB et al., 2019) han demostrado que el impacto del BoP es menor con respecto a otros componentes del sistema de electrólisis. Se va a realizar un modelo de BoP basado en la literatura y suposiciones.



Figura 2-5. Electrolizador contenerizado

Se sabe que los electrolizadores no tienen muchas partes móviles por lo que suele hacer cambios de stacks completos (Bhandari et al., 2014).

Aunque los electrolizadores suelen tener integrado sistemas de purificación, el hidrógeno producido en la electrólisis alcalina alcanza purezas del 99,5 – 99,9% por lo que requiere un paso adicional de purificación, mientras que en la electrólisis PEM directamente se alcanzan purezas >99,99%. Al igual que en el reformado, el hidrógeno producido se comprime para su almacenamiento ya que sale entre 1 y 30 bar de presión (Largui, 2022), dependiendo del tipo de electrolizador.

La compresión hasta 200 bar se realiza en una etapa desde la presión de salida de la unidad PSA (electrolizadores alcalinos) o directamente a la salida del electrolizador (PEM). Durante la compresión se genera calor que hay que disipar, mediante un sistema de refrigeración que permite reducir a valores inferiores a 40°C. La selección de tecnología del compresor puede variar con el escalado y las presiones de entrada y salida.

2.5 Descripción de los sistemas

2.5.1 Reformado de metano con vapor o *Steam methane reforming (SMR)*

A continuación, se describen los procesos involucrados en la generación de H₂ por este método, examinando una por una las etapas de transformación del gas natural en hidrógeno.

2.5.1.1 Pretratamiento de gas natural

El metano crudo como materia prima suele tener impurezas ácidas (H₂S y CO₂) las cuales deben ser retiradas ya que envenenan los catalizadores de reformado, mediante un proceso de absorción con monoetanolamina (MEA) que tiene un porcentaje de captura o capacidad de carga de CO₂ dado en mol CO₂/mol MEA (Sánchez, 2023).

De acuerdo con un proceso descrito por (Yang et al., 2011) El gas es enviado a la columna de absorción, donde tras reaccionar suficientemente con la solución de MEA a temperatura ambiente y saturarse la amina, se recolecta el gas purificado por la parte superior del absorbedor (S2) (Figura 2-6) mientras en el fondo de la columna se recoge la solución de MEA saturada con CO₂ y H₂S (MEA rica).

La MEA debe regenerarse para poder usarse nuevamente. De acuerdo con (Yang et al., 2011) el gas es enviado a la columna de absorción, donde tras reaccionar suficientemente con la solución de MEA a temperatura ambiente y saturarse la amina, por la parte superior del absorbedor (S2) se recolecta el gas purificado (Figura 2-6) mientras en el fondo de la columna se recoge la solución de MEA rica o saturada con CO₂ y H₂S. La MEA debe regenerarse para poder usarse nuevamente hasta su degradación. Para regenerar la MEA se calienta a la temperatura de desorción. La corriente de CO₂ caliente sale por arriba y la amina regenerada caliente por abajo, de ambas corrientes se recupera calor. La regeneración de MEA representa el mayor consumo de energía del proceso con lo que el consumo energético de operación de equipos auxiliares se desprecia. En procesos industriales el calor necesario generalmente puede provenir del vapor generado por una caldera.

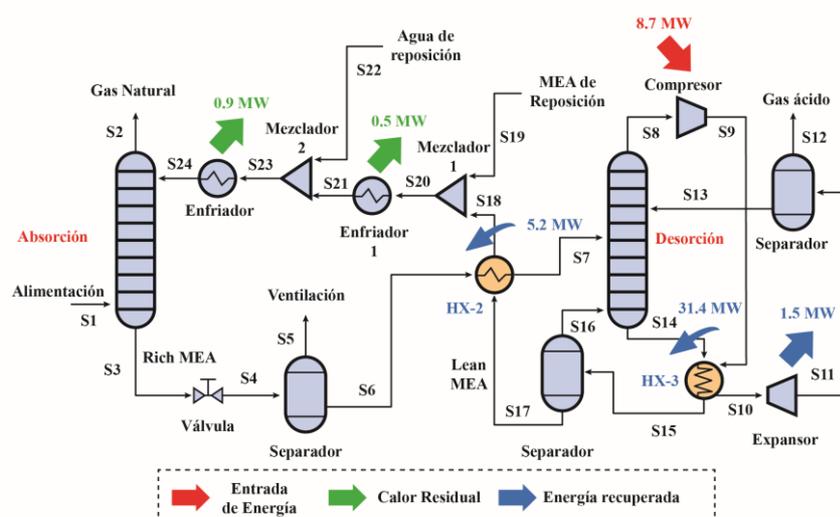


Figura 2-6. Balance de materia y energía pretratamiento de gas natural

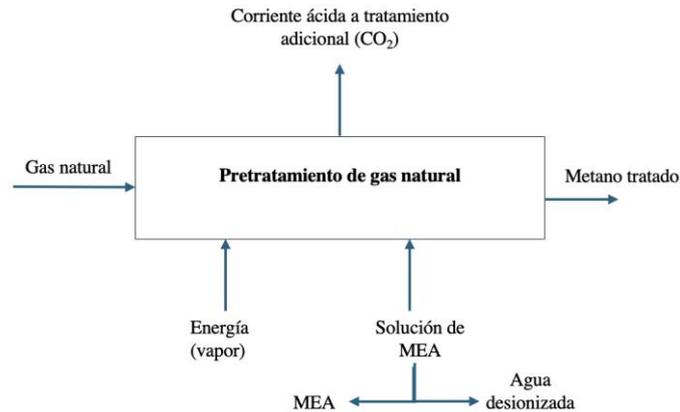


Figura 2-7 Diagrama de entradas y salidas Pretratamiento de gas natural

La concentración de la solución de MEA suele ser del 25% - 30% en agua desionizada ya que la MEA es sensible a la presencia de iones pudiendo precipitar sales y causar corrosión e incrustaciones (Wang et al., 2023). Mayormente se regenera, pero tiene una vida útil por lo que se realizan varias cargas de amina durante la vida de la planta.

El proceso además consume agua para la preparación de la solución y sistemas de enfriamiento para disipar el calor sensible que se genera cuando el CO₂ es absorbido por la solución de MEA. Sin embargo, se supone que esta se recupera, aunque habrá algunas pérdidas por evaporación. Los reportes no mencionan que se hace con la corriente ácida después de separarse del gas natural. Sin embargo, de este subproducto se puede recuperar el azufre en un proceso conocido como Claus, el proceso de recuperación del azufre se sale del alcance de este trabajo (Velasco, 2014).

2.5.1.2 Reformado

Una vez limpio, el gas natural se mezcla con vapor de agua a presión (3-25 bar), se incrementa la temperatura a unos 700-900 °C y se introduce en un lecho catalítico en base níquel para producir gas de síntesis Figura 2-8 (Guilera et al., 2020).

La reacción es altamente endotérmica ($\Delta H_r = 206 \text{ kJ/mol}$) Las altas temperaturas requeridas en el reformador se consiguen con la quema de gas residual del PSA (off gas) obtenido en la etapa de purificación como combustible, junto con un gas natural para equilibrar el trabajo del reformador Figura 2-8 (tomado de Navarro, 2011). En esta combustión se genera el CO₂ de combustión, de la reacción $\text{CH}_4 + 2\text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O}$, el cual no es capturado generalmente, y aunque al reformado se alimenta vapor, este se alimenta a temperaturas entre 120 y 180°C.

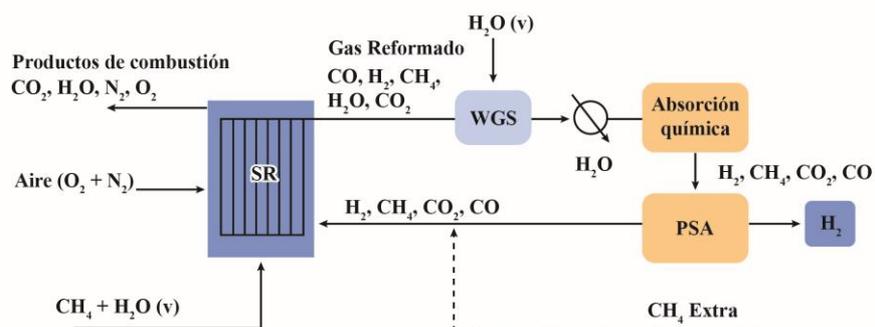


Figura 2-8. Esquema Reformado de gas natural

Por otro lado, se generan emisiones de CO_2 (gas de escape) por la combustión del CH_4 para alcanzar las altas temperaturas del reformado. El vapor se agrega en una relación vapor a carbono (V/C) 3:1 para favorecer el desplazamiento de la reacción hacia la formación de hidrógeno.

Los catalizadores están basados en níquel soportados sobre materiales cerámicos y suelen incluir promotores para optimizar sus características. Por lo general, contienen un 15-25% de NiO sobre alúmina. El catalizador se prepara con níquel y ácido nítrico para formar el precursor de níquel, de nitrato de níquel, este disuelto en agua se impregna sobre el soporte de alúmina (óxido de aluminio), se seca y se calcina formando el óxido de níquel NiO (Agarski et al., 2017).

El catalizador soportado se introduce en tubos dentro de la cámara de reformado. La vida útil del catalizador de reformado es de 6 años (Fouad & Gaber, 2019).

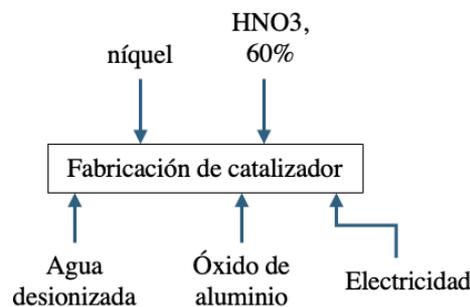


Figura 2-9. Fabricación catalizar basado en níquel

El catalizador se tritura y luego se calcina hasta obtener cenizas, las cuales son sometidas a un proceso de lixiviación con ácidos Figura 2-10. Este proceso se describe como un bucle cerrado, lo que significa que se reutilizan insumos (Yang et al., 2011).

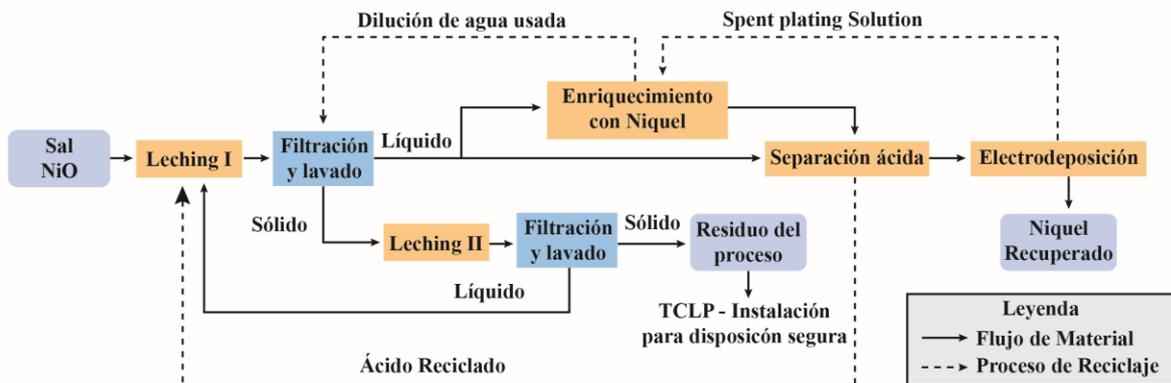


Figura 2-10. Proceso de reciclado de catalizador NiO

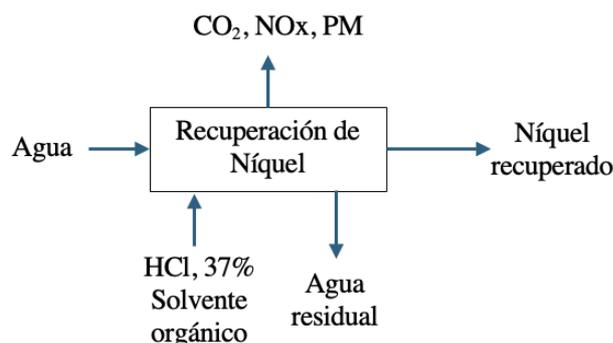


Figura 2-11. Recuperación de níquel del catalizador de reformado

Durante el proceso de reformado con vapor, se genera vapor que se recicla para su uso en la misma instalación, lo que contribuye a optimizar el consumo de recursos. Además, para operar bombas y otros equipos auxiliares necesarios para el funcionamiento del sistema, se adquiere electricidad de la red (Spath & Mann, 2001).

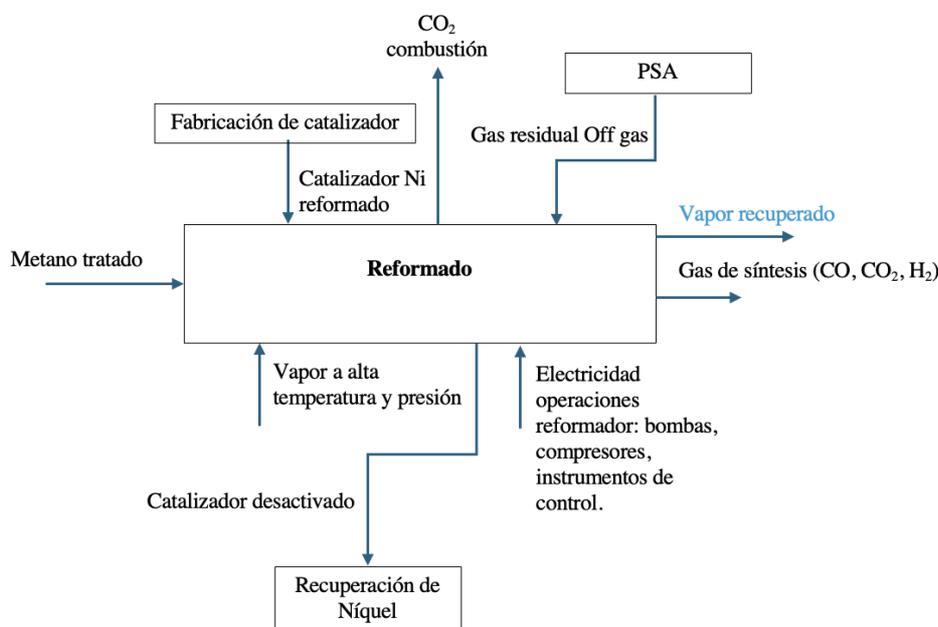


Figura 2-12. Diagrama del proceso reformado

Una vez se consigue la mezcla de gas de síntesis (CO e H₂) se pasa a la unidad de desplazamiento para convertir el monóxido de carbono (CO) a dióxido de carbono (CO₂) e incrementar la cantidad de hidrógeno final (2-2)



El CO se convierte en H₂ en la reacción de desplazamiento agua gas que tiene lugar en dos reactores, uno de alta temperatura y otro de baja temperatura. La reacción es exotérmica ($\Delta H_r = -41,1 \text{ kJ/mol}$) y ocurre sobre la superficie de los catalizadores. En los dos ocurre la misma reacción entre el CO y vapor de agua para producir CO₂ e H₂. En el reactor a alta temperatura se usa un catalizador de hierro y se opera a temperaturas entre 320 °C a 450° C.

En el reactor de baja temperatura se usan catalizadores basados en cobre y se opera a temperaturas entre en el rango 150 °C - 250 °C. La conversión de CO se favorece a bajas temperaturas, sin

embargo, las altas temperaturas incrementan la velocidad de la reacción. La presión no afecta el equilibrio de la reacción, pero mejora la conversión (Baraj et al., 2020).

Después de la salida del reactor de alta temperatura, el gas de síntesis todavía contiene algo de CO y H₂O. Para eliminar aún más el CO y aumentar la concentración de H₂ se lleva a cabo la reacción a baja temperatura. La reacción que ocurre es la misma, pero a menor velocidad. A la salida de este reactor, se espera que la concentración de H₂ sea aún más alta que en el reactor de alta temperatura, generalmente alcanzando el 80% o más, dependiendo de las condiciones de operación. Se utiliza un catalizador de óxido de cobre y zinc. El vapor introducido a cada reactor debe estar a temperaturas cercanas a las del reactor. Además, el proceso se lleva a cabo a la misma presión del reformado.

La fabricación de catalizador consiste en la mezcla de precursores del óxido de hierro como Fe₂O₃ y óxido de cromo Cr₂O₃ en proporción 85%-15%, respectivamente. Esta mezcla se peletiza y calcina a temperaturas alrededor de 400°C para estabilizar y activar el catalizador (Baraj et al., 2021). El catalizador basado en hierro puede usarse hasta 5 años, antes de requerir reemplazarlo por nuevo catalizador.

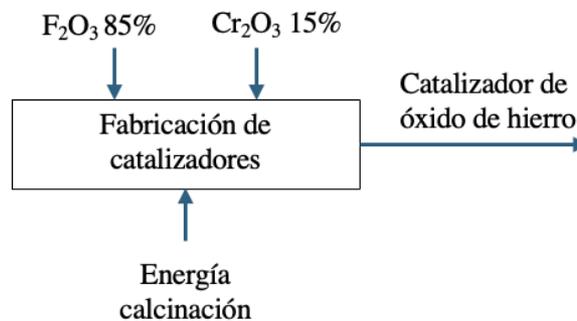


Figura 2-13. Catalizador de óxido de hierro

El catalizador de cobre y zinc se prepara a partir de sales de Cu, Zn, y Al en forma de nitratos, típicamente se prepara una solución con la composición atómica alrededor de 31% Cu, 19% Zn, 50% Al. Esta solución se agrega a otra solución del mismo volumen de Na₂CO₃, se precipitan los carbonatos con NaOH y se seca a 373K por 24 horas (Li et al., 2017).

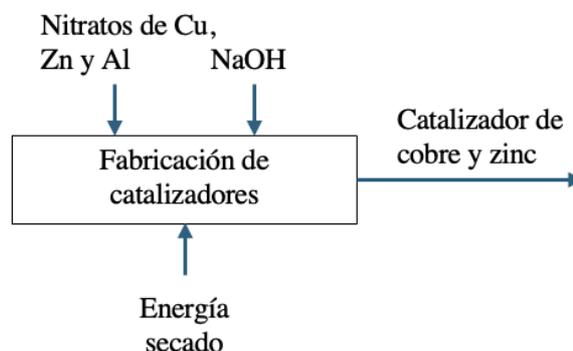


Figura 2-14. Catalizador de cobre y zinc

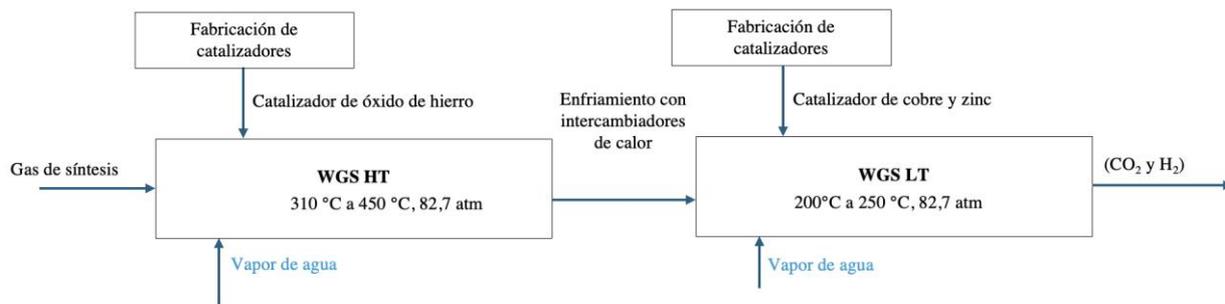


Figura 2-15. Diagrama del proceso WGS

Pueden producirse entre 9 y 11 toneladas de CO₂ por tonelada de hidrógeno producido por lo que en este punto la composición de la corriente puede estar H₂ (70-80%), CO₂ (15-25%), CH₄ (3-6%), CO (0,5 – 3%), para separar el CO₂ se puede instalar una unidad de captura post-combustión (CCS) por absorción química con MEA cuya descripción se explica en el *Pretratamiento de gas natural*, y que consiste en poner en contacto una solución comercial de aminas con el gas a baja temperatura para retener el dióxido de carbono en la solución.

Una vez la solución está saturada, se incrementa la temperatura de la solución (120-160°C) para desorber el dióxido de carbono. De este modo, se obtienen dos corrientes: un gas limpio y una corriente de dióxido de carbono que puede ser comercializada (Figura 2-16, tomado de Guilera et al., 2020)

La eficiencia de captura de las plantas de hidrógeno está alrededor del 90%. Para su comercialización, el dióxido de carbono debería ser acondicionado; es decir: limpiado, comprimido hasta 8Mpa y 31°C para su distribución por tuberías que es el método más consolidado de transportar el CO₂ (*Captura y Almacenamiento de CO₂*, n.d.). Tras la captura con MEA se obtienen riquezas cercanas al 96% (Sánchez, 2023).

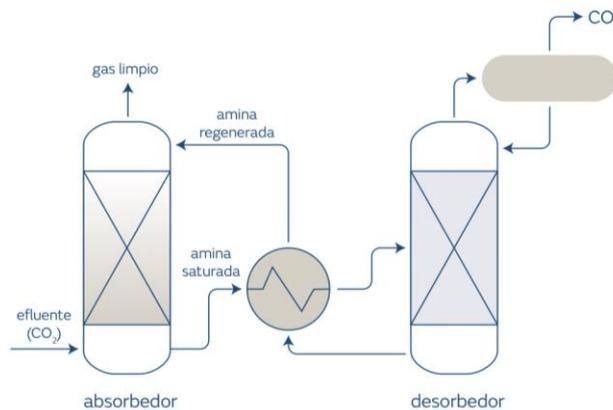


Figura 2-16. Absorción post-combustión del CO₂

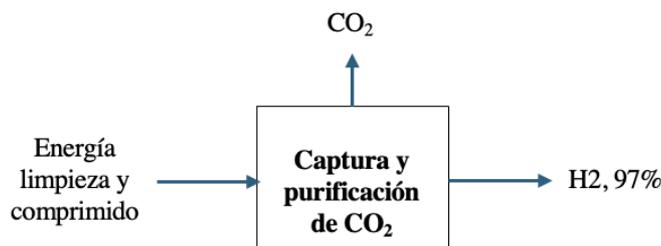


Figura 2-17. Captura del CO₂ postcombustión

En la Figura 2-17 se han limitado las entradas al proceso de absorción química con MEA a la energía consumida por el proceso ya que es varios ordenes de magnitud mayores a las demás entradas descritas en Figura 2-7 Diagrama de entradas y salidas Pretratamiento de gas natural

2.5.1.3 Purificación PSA

La producción a gran escala de hidrógeno, con la pureza deseada, se realiza en unidades de adsorción por oscilación de presión (PSA) que operan a presiones de hasta 7 MPa utilizando el ciclo de Skarstrom (Krishna, 2020).

En el sistema PSA, el hidrógeno con impurezas como nitrógeno, oxígeno, CO_2 , CO , y humedad, va pasando a través de columnas llenas de tamices moleculares de carbono (CMS), zeolitas o tamices moleculares. El principio básico radica en el uso de alta presión, a mayor presión, se adsorbe una mayor cantidad de gas (Kadam & Panwar, 2017). En el caso más simple Figura 2-18 los cuatro pasos en la secuencia son los siguientes:

- Presurización (con alimentación o producto de refinado)
- Separación por adsorción a alta presión con alimentación, con retirada del producto de refinado purificado.
- Despresurización, o “blowdown”, en contra corriente a la alimentación
- Desorción a la presión operativa más baja. Esto se logra mediante evacuación o purga del lecho con (una porción) del producto (hidrógeno).

Comúnmente, la primera capa es de alúmina o sílice, que retiene el vapor de agua. Luego, se utiliza una capa de carbón activado para adsorber selectivamente el CO_2 . La tarea principal de las capas de alúmina y carbón es evitar que el vapor de H_2O y el CO_2 lleguen a la capa de zeolita. La última capa es una zeolita intercambiada con cationes, con una capacidad mejorada para CO y N_2 .

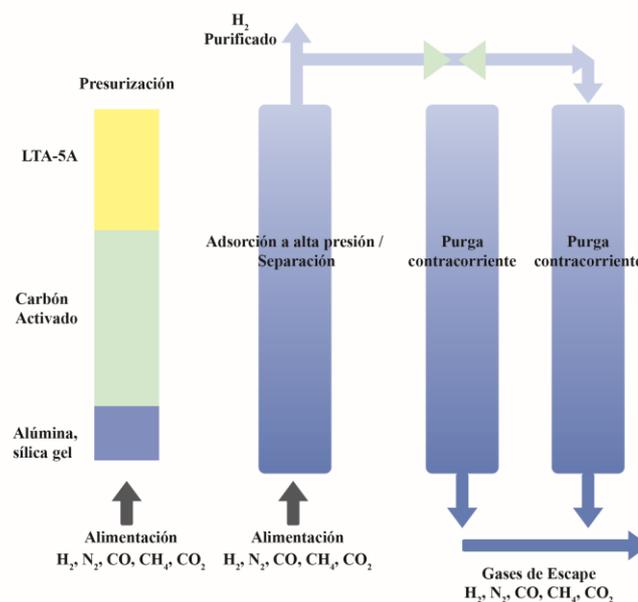


Figura 2-18. Esquema del proceso PSA

Los gases residuales son un subproducto del proceso, y suelen recircularse al reformador para optimizar la eficiencia del proceso ya que contiene una cantidad significativa de hidrógeno, pero requiere calentarse hasta 700° ya que el proceso de PSA suele hacerse a temperaturas entre $25 - 50^\circ\text{C}$. Ver resumen en la Figura 2-19. Otra parte puede quemarse para recuperar energía que puede ser usada para generar vapor.

El hidrógeno puro fluye hacia un tanque de acumulación donde se almacena temporalmente. Desde el tanque de acumulación, el hidrógeno purificado se presuriza y se usa para aumentar la presión en las columnas.

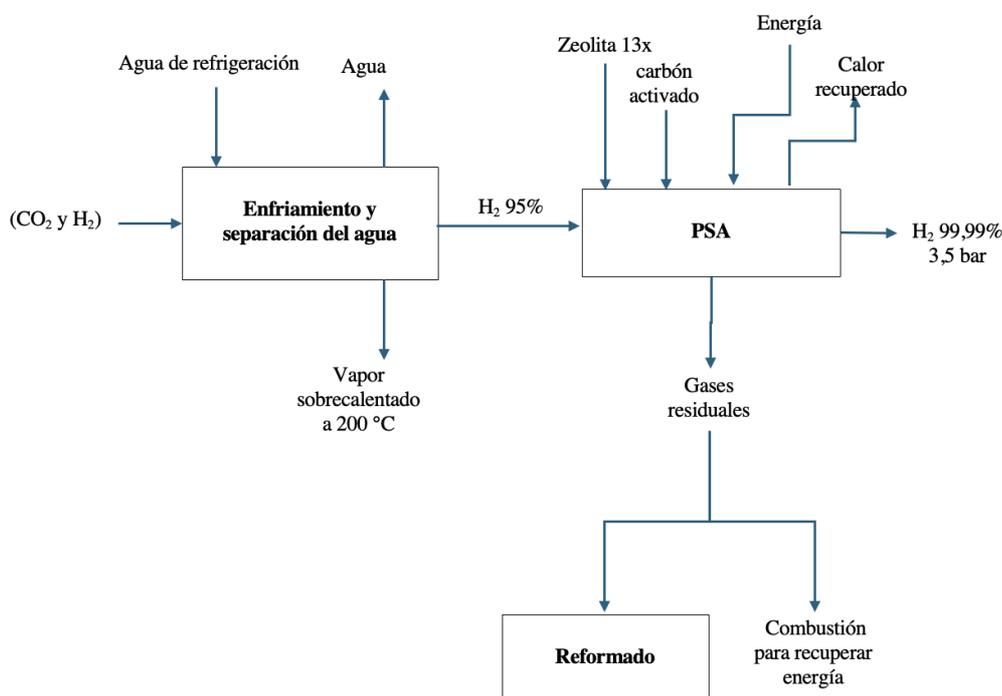


Figura 2-19. Diagrama del proceso de separación y purificación

Los compresores de gas utilizados para presurizar el hidrógeno antes y después del proceso de PSA son los principales consumidores de energía. La energía necesaria depende de la presión de operación y del volumen de gas que se debe comprimir, alrededor de 20 bar y descompresión en 3,5 bar fijándose esta última como la presión de salida (Ferraces Azcunaga & López Gestoso, 2016). Los tamices moleculares de carbono utilizados en el proceso PSA tienen una vida útil determinada y deben ser reemplazados periódicamente.

El uso de lechos adsorbentes de 2 o 3 capas es otra característica importante de la tecnología de PSA empleada actualmente para la purificación de hidrógeno. Utiliza una capa de carbón activado (AC) para adsorber selectivamente CO₂ y una capa es una zeolita intercambiada con cationes (como LTA-5A, con cationes extra-estructurales Na⁺ y Ca⁺⁺, y NaX, también comúnmente denominada por su nombre comercial 13X, con cationes extra-estructurales Na⁺) con capacidad mejorada para CO y N₂.

2.5.1.4 Compresión

El almacenamiento de hidrógeno en tanques de alta presión es un proceso crucial que permite almacenar una mayor cantidad de hidrógeno en un volumen reducido, en planta esta presión de almacenado es 200 bar. Para este fin, se emplean compresores de pistón recíprocos, los cuales son los más comunes debido a su capacidad para alcanzar las altas presiones requeridas además de no requerir lubricación. El mecanismo de accionamiento, como un motor eléctrico, proporciona la potencia para comprimir el gas hidrógeno. Varias empresas producen estos sistemas de compresores, incluyendo Siemens Energy, Howden, Neuman & Esser Group y Pure Energy Centre. (Orlova et al., 2023). El hidrógeno es expulsado del cilindro hacia el tanque de almacenamiento liberando calor por la compresión.

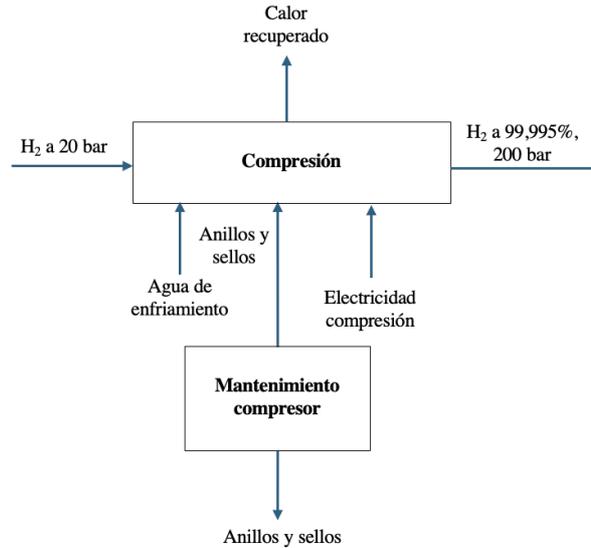


Figura 2-20. Diagrama Compresión para almacenamiento en tanques

Al comprimir un gas, la temperatura aumenta debido al trabajo realizado sobre el gas. En la mayoría de los sistemas de enfriamiento utilizados en compresores y otros equipos industriales, el agua de enfriamiento se recircula. Para un compresor de pistón recíprocante de funcionamiento en seco, la rutina básica de mantenimiento incluye revisiones regulares y el reemplazo de componentes críticos como los anillos de pistón, anillos de soporte y anillos guía. Estas piezas están sujetas a desgaste debido a la fricción constante y la presión del gas. En la mayoría de los casos, los anillos de pistón en compresores de hidrógeno de funcionamiento en seco requieren ser reemplazados después de 4000 horas de operación, dependiendo de las condiciones específicas de operación, como la temperatura, presión y pureza del gas. Esto es típico de los anillos de pistón basados en PTFE, que se utilizan comúnmente en aplicaciones de hidrógeno debido a su baja fricción y resistencia a la fragilización por hidrógeno (Feistel, n.d.).

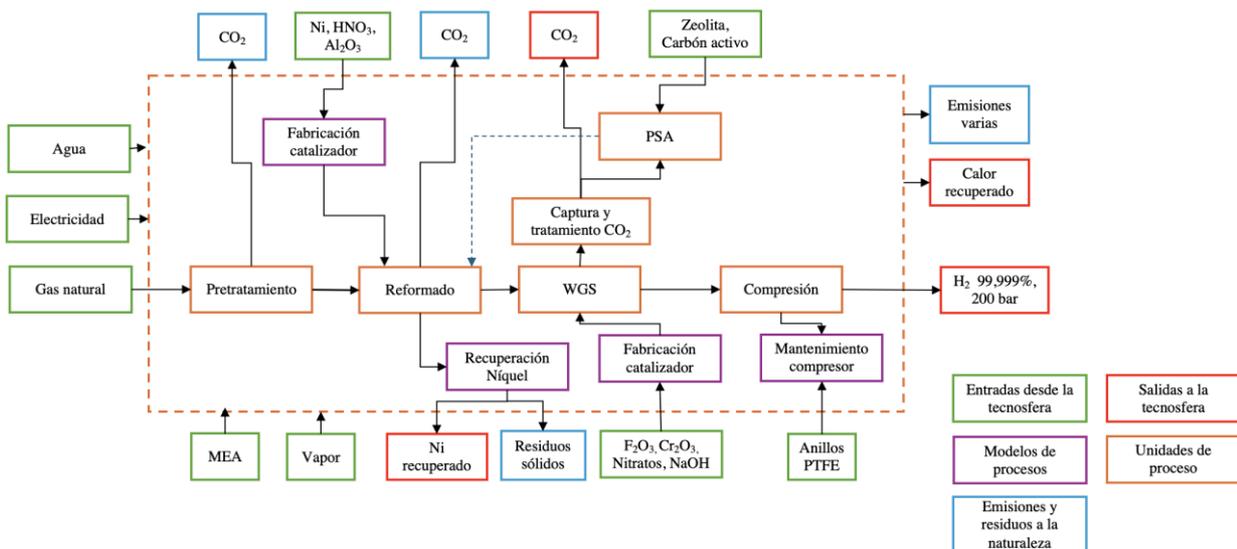


Figura 2-21. Diagrama de procesos hidrógeno producido por SMR/CCS

2.5.2 Electrólisis Alcalina

Los electrolizadores alcalinos, son los más comunes en la actualidad debido a su rentabilidad económica y madurez tecnológica. Utilizan una disolución alcalina, generalmente de hidróxido de potasio (KOH), como electrolito para la conducción de iones.

Esta tecnología se caracteriza por su baja densidad de corriente, lo que significa que produce una menor cantidad de hidrógeno por unidad de volumen del equipo (MITERD, 2020). Respecto al tamaño, la tecnología alcalina tiene una mayor madurez y una operación estable a potencia nominal a gran escala frente a los electrolizadores PEM (Matute Gomez et al., 2022).

2.5.2.1 Celda alcalina

Se componen de dos electrodos (cátodo y ánodo) recubiertos con metales no nobles para facilitar las reacciones electroquímicas separados entre sí por una membrana o diafragma. Al aplicar una corriente continua a los electrodos, se genera hidrógeno en el cátodo y oxígeno en el ánodo (Figura 2-22, adaptado de (IRENA, 2020)).

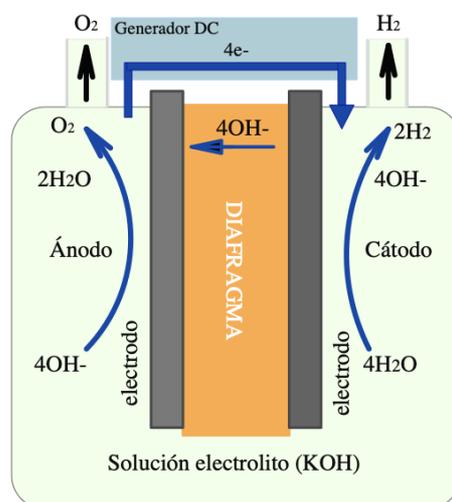


Figura 2-22. Ilustración celda electrolisis alcalina

Este dispositivo se sumerge en un electrolito líquido altamente concentrado, generalmente una solución de KOH (20-30 %p/p), con el propósito de maximizar la conductividad iónica. El gas hidrógeno evoluciona del cátodo, donde el agua se reduce, produciendo aniones hidróxido que circulan a través del diafragma hacia el ánodo dentro del campo eléctrico establecido por la fuente de alimentación externa.

Los aniones hidróxido se recombinan en la superficie del ánodo (2-3) para producir oxígeno que burbujea hacia el colector de gas, liberando electrones que cierran el circuito eléctrico (Ursúa et al., 2011).



En la superficie del cátodo, los aniones hidróxido se recombinan para generar oxígeno (2-4).



El diafragma separa las zonas de reacción entre sí previniendo el mezclado de los gases producidos, siendo permeable a los iones acuosos pero impermeable a los gases, el más comúnmente conocido utiliza dióxido de circonio (ZrO_2) sobre una base polimérica y se

comercializa bajo el nombre de Zirfon™ (Agfa-Gevaert N.V.). Actualmente, Zirfon™ Perl UTP 500 es uno de los separadores más utilizados (Brauns et al., 2021).

Los electrodos se ponen a cada lado del diafragma. La membrana y los electrodos juntos se denominan Conjunto de Electrodo de Membrana (MEA, por sus siglas en inglés). El ánodo es usualmente de níquel o de acero inoxidable cubierto con níquel, mientras el cátodo es de acero activado por una capa con diferentes catalizadores (Ramchandra Bhandari, 2014). Para el cátodo, los catalizadores de níquel alcanzan una alta estabilidad usando recubrimientos de materiales más activos como aluminio hierro y cobalto. Los catalizadores Raney-Níquel dopado con Fe, Cr, Mo, Sn y Co también presentan ventajas en comparación con electrodos solo de Ni (Antonio Valente, 2019).

Los catalizadores son cargados sobre la superficie activa del electrodo en una cantidad que se mide en gramos por metro cuadrado (g/m^2) o miligramos por centímetro cuadrado (mg/cm^2). La celda puede degradarse debido a varios factores físicos, químicos y operativos que afectan la vida útil del sistema y el rendimiento para lo cual se requiere el uso de recubrimientos resistentes a la corrosión, y membranas de alta durabilidad como zirfon, agua con baja conductividad y sin impurezas.

Cada celda tiene un empaque y sello de goma para evitar la fuga de gases, además de los Platos bipolares (BPP) en acero al carbono para separar celdas individuales en un conjunto y proporcionar conducción eléctrica entre las celdas (Figura 2-23, adaptado de Krishnan et al., 2023)

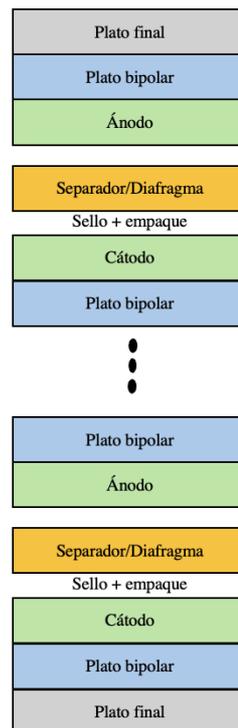


Figura 2-23. Ensamble de celdas en un ensamblado alcalino

El electrodo posee una superficie que está en contacto directo con el electrolito y donde ocurren las reacciones electroquímicas. Esta área es crucial porque afecta directamente la eficiencia, la densidad de corriente de la celda y la producción de hidrógeno. Para un electrodo liso y plano, el área activa es simplemente la superficie geométrica $A_{\text{activa}} = \text{ancho} \times \text{alto}$. Una mayor área activa puede permitir la operación a densidades de corriente más bajas para la misma corriente total, lo que puede reducir el desgaste de los electrodos y mejorar la eficiencia.

2.5.2.2 Integración de Stacks

El *stack* está compuesto por varias celdas y se cierra con platos de acero inoxidable en los extremos, estos aplican presión sobre las celdas para mantener la estructura y evitar que los gases escapen de las celdas, asegurando una compresión uniforme sobre toda el área de la celda.

Un electrolizador alcalino dependiendo de su potencia puede consistir en varios *stacks* de decenas de celdas cada uno (Koj JC, 2017) para lograr el área activa necesaria para la potencia del sistema.

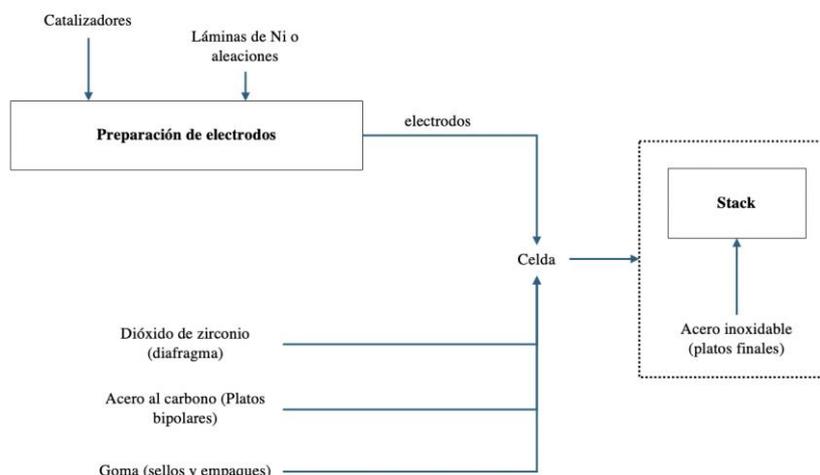


Figura 2-24. Diagrama fabricación de celdas y stacks alcalinos

La Figura 2-24 resume el modelo para la fabricación de stacks. Un stack tiene un área activa igual a la suma de las áreas activas de todas las celdas individuales (N) en él. Si cada celda tiene un área activa A_{celda} , la del stack será:

$$A_{stack} = N \times A_{celda} \quad (2-5)$$

Se pueden acoplar más de 230 celdas por stack. El stack tiene tiempo de vida en el que es operativo y eficiente (Krishnan et al., 2023).

2.5.2.3 Ensamble del sistema y operación de la planta

Consiste en integrar los *stacks* con todos los subsistemas necesarios para un correcto funcionamiento de una unidad o proceso. La Figura 2-25 muestra un esquema de la producción de hidrógeno usando electrolizadores alcalinos (Reyes, 2022).

Los stacks se conectan a una fuente de energía la cual previamente ha sido convertida con un transformador. El H_2 y el O_2 salen mezclados con KOH por lo que se requiere una bomba de recirculación del KOH, y demisters para regular caudales de salida de gases, también se requiere un calentador para alcanzar la temperatura de operación del proceso.

Una vez que se produce la separación del agua, el gas de hidrógeno y oxígeno, que pueden arrastrar pequeñas gotas de electrolito en forma de niebla, pasan a través de separadores de gas/líquido. El demister elimina las partículas más finas de niebla, asegurando que el gas salga lo más seco y puro posible.

La solución de KOH que se separa se recircula, pasando por un filtro que elimina residuos de corrosión de los electrodos. La solución filtrada llega a un tanque de lejía donde se ajusta la concentración de electrolito y se enfría en un intercambiador de calor. Este proceso también permite la recuperación de energía térmica, antes de ser devuelta al sistema para su reutilización (Givirovskiy G, 2019).

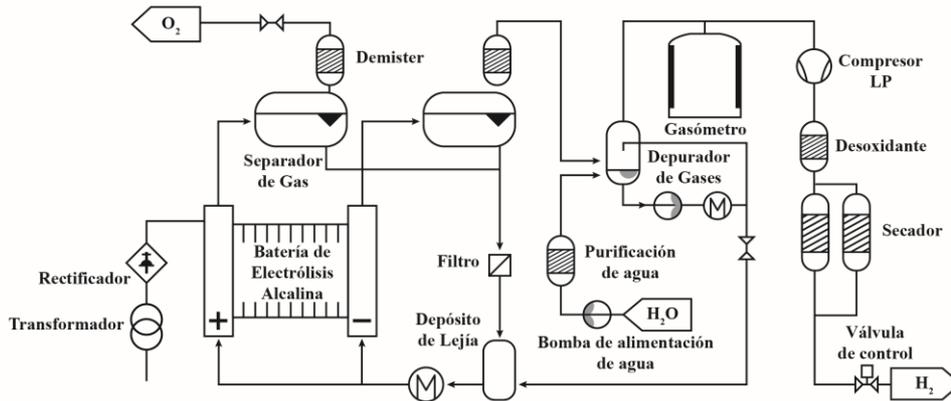


Figura 2-25. Esquema de balance de planta electrolizador alcalino

La construcción de un electrolizador se resume en la Figura 2-26. El BoP puede agruparse en:

Sistema de Suministro de Energía: Este sistema típicamente consiste en transformadores y rectificadores que convierten la tensión de corriente alterna (CA) en la tensión de corriente continua (CC) necesaria para el electrolizador. La fuente de alimentación de corriente continua se utiliza porque proporciona un flujo constante y unidireccional de corriente eléctrica. Además, suministra tensión de corriente alterna a varios componentes individuales dentro del Balance de planta (BOP).

Sistema de Recirculación de Electrolito: El BOP debe incorporar el acondicionamiento continuo del electrolito. Esto incluye sistemas de filtración y recirculación para eliminar impurezas.

Sistema de Producción y Purificación de Hidrógeno: El sistema de producción de hidrógeno asegura que el hidrógeno generado sea recolectado y procesado para su uso. Esto incluye el secado y purificación del hidrógeno para eliminar la humedad y trazas de electrolito y otros gases. Se pueden emplear tecnologías como la adsorción por oscilación de presión (PSA) para alcanzar los niveles de pureza deseados.

Seguridad y Monitoreo: El BOP también debe integrar características de seguridad, incluidos sistemas de detección de fugas de gas y dispositivos de monitoreo de presión que se utilizan para monitorear continuamente las condiciones. Estos sistemas pueden activar paradas de emergencia si se detectan fugas para prevenir situaciones peligrosas (hyfindr, n.d.).

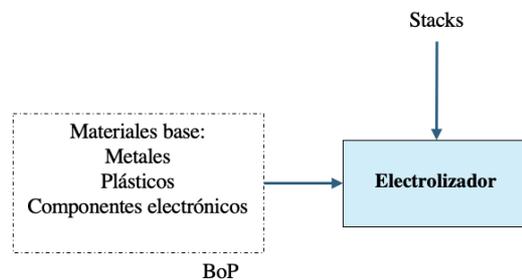


Figura 2-26. Construcción de electrolizador Alcalino

2.5.2.4 Electrólisis

El transformador transforma corriente alterna (CA) de alto voltaje en bajo voltaje. En el rectificador la CA se convierte en corriente continua (CC). En el electrolizador la corriente es usada para descomponer el agua. En este paso puede perderse energía de acuerdo con la eficiencia

de la conversión. En el electrolizador alcalino, el agua se adiciona con lejía para mejorar su conductividad. la lejía (solución de KOH) Figura 2-25 se bombea tanto por el ánodo como por el cátodo del electrolizador.

Cuando los módulos están conectados en serie, la misma corriente fluye a través de las celdas. En este caso cada electrodo, excepto los finales, tiene dos polaridades. Esta configuración es llamada bipolar, y los módulos conectados en esta configuración se conocen como stacks. En esta configuración el voltaje del módulo V_M es igual a la suma de los voltajes conectados (Figura 2-27) (Ursúa et al., 2011).

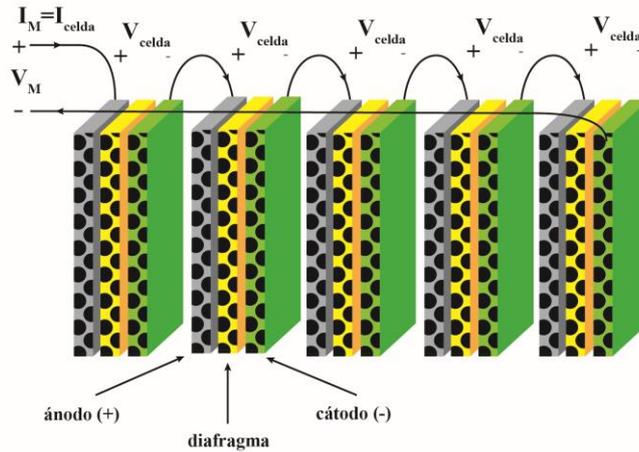


Figura 2-27. Configuración de un módulo bipolar

En condiciones ideales, el voltaje de celda teórico para la electrólisis del agua es aproximadamente 1,23 V a T ambiente y la presión estándar. Debido a varias pérdidas energéticas, sobrepotencial, resistencias ohmicas, pérdida de activación; el voltaje de celda real es más alto. Habitualmente, el voltaje de una celda de sistemas de electrólisis alcalina ánodo/cátodo es entre 1,8 y 2,5 V por celda para electrodos de acero inoxidable y catalizadores basados en níquel. El uso de otros catalizadores reduce el voltaje de celda. Sobrepotencial se refiere a la diferencia entre el voltaje teórico, el potencial del electrodo y el voltaje real necesario para crear electrólisis en condiciones prácticas; por lo tanto, el potencial nominal es el voltaje necesario para superar potencial adicional.

La potencia eléctrica que el sistema consume durante su operación a plena capacidad es la potencia nominal del sistema. La producción de hidrógeno en un electrolizador está determinada por la cantidad de electricidad utilizada. La eficiencia del proceso de electrólisis, generalmente expresada como eficiencia de conversión de energía, también juega un papel crucial. La relación básica se puede expresar mediante la fórmula:

$$Producción\ de\ Hidrógeno = \frac{Potencia\ nominal \times Eficiencia}{Energía\ específica\ del\ hidrógeno} \quad (2-6)$$

La eficiencia representa la relación entre la energía contenida en el hidrógeno producido y la energía necesaria para electrolizar el agua consumida durante el proceso, puede ir de 0 a 1. En consecuencia, se puede calcular fácilmente como la relación entre el poder calorífico superior (PCS) del hidrógeno (3.54 kWh/Nm³) y el consumo de energía (CE) en kWh/Nm³ (2-7):

$$Eficiencia = \frac{PCS\ del\ hidrógeno}{CE} \quad (2-7)$$

Los electrolizadores alcalinos permiten una operación significativamente eficiente con valores habituales en el rango del 47%-82%. Cada celda consume una cantidad de energía eléctrica durante su operación a plena capacidad o potencia nominal de celda. Dada por la siguiente expresión:

$$P_{celda} = V_{celda} \times I_{celda} \quad (2-8)$$

Así mismo como las celas se agrupan en stacks de celdas conectadas en serie, el voltaje del stack se obtiene multiplicando número de celdas por el voltaje de celda y la potencia del stack multiplicando voltaje de stack por corriente de celda que es igual a corriente de stack:

$$V_{stack} = N \times V_{celda} \quad (2-9)$$

$$P_{stack} = V_{stack} \times I_{celda} \quad (2-10)$$

El número de celdas necesarias para alcanzar la potencia nominal del sistema está dado por:

$$N_{celdas} = \frac{\text{Potencia nominal del sistema}}{\text{Potencia nominal de un celda}} \quad (2-11)$$

La corriente de celda se mide en amperes (A) y se puede calcular utilizando la densidad de corriente y la superficie activa del electrodo.

$$I = \text{Densidad de corriente} \times \text{Área superficie electrodo} \quad (2-12)$$

La densidad de corriente es la cantidad de corriente eléctrica que fluye a través de una unidad de área del electrodo. Se expresa en amperios por centímetro cuadrado (A/cm²) y afecta directamente la eficiencia, la producción de hidrógeno y la vida útil del sistema de electrólisis. En electrolizadores alcalinos comerciales, la densidad de corriente suele estar en el rango de 0.2 a 0.4 A/cm². Está condicionada por el material de los electodos, la concentración del electrolito, la temperatura y la distancia entre electodos. Por esto, utilizar configuraciones como la de "gap cero" donde la distancia entre los electodos es mínima puede optimizar la densidad de corriente y emplear materiales con alta conductividad y durabilidad, como electodos de níquel recubiertos con catalizadores avanzados.

En los electrolizadores alcalinos, el hidrógeno se produce mediante la electrólisis del agua en un medio alcalino, típicamente una solución de hidróxido de potasio (KOH). Según la reacción global cada mol de agua produce dos moles de hidrógeno y un mol de oxígeno.



Se necesitan 18 gramos de agua (1 mol) para producir 2 gramos de hidrógeno (1mol), es decir en una proporción 9:1 Agua-hidrógeno. El agua puede consumirse también en los sistemas de refrigeración del BoP por evaporación y purgas. El electrolizador alcalino opera entre 40 y 80°C y una presión entre 3-30 bar. El hidrógeno después del secado alcanza purezas entre 99,5-99,9% (Buttler & Spliethoff, 2018).

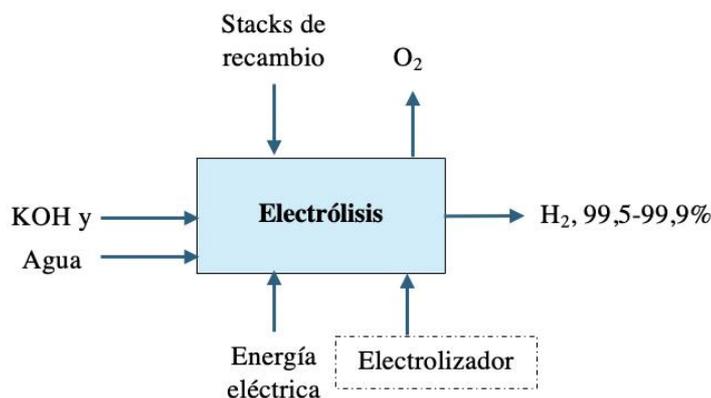


Figura 2-28. Electrólisis alcalina

El hidrógeno y el oxígeno pueden generarse tanto a presiones elevadas como atmosféricas. Los electrolizadores alcalinos a presión atmosférica operan sobre los 6 bar, mientras que los que de elevada presión operan entre 6 y 30 bar. Las altas presiones aumentan la permeabilidad de los gases disminuyendo la pureza del producto (Smolinka, 2015).

El fin de vida del stack puede calcularse a partir de la tasa de degradación del stack en celdas de combustible, la cual se suele expresar como un porcentaje de pérdida de rendimiento por cada 1,000 horas de operación dado lugar a un recambio de stacks Figura 2-28. Esta medida indica cuánta eficiencia o potencia se pierde en el stack durante un periodo de tiempo específico. También puede encontrarse que los fabricantes establezcan el tiempo de vida del stack.

2.5.2.5 Purificación

Los electrolizadores alcalinos comerciales suelen tener incluidos los sistemas de purificación para obtener hidrógeno a estas purezas como se ve en la Figura 2-25, sin embargo, también pueden incluir un sistema de purificación adicional (Ursúa et al., 2011), para remover oxígeno y agua en forma de vapor del gas producido. Pueden ser absorbedores de oxígeno y secadores de gas. El hidrógeno producido por estos electrolizadores puede alcanzar una pureza en el rango de 99.5-99.9% y presiones que oscilan entre 0.1 y 1.0 MPa (1 a 10 bar), debido a la presencia de vapor de agua y otros contaminantes residuales. Basándonos en (Ursúa et al., 2011) se puede suponer que el paso adicional de purificación corresponde al secado en una unidad PSA al vacío (VPSA), donde se elimina el agua hasta niveles inferiores a 5 ppm (Ligen et al., 2020).

El VPSA opera bajo el principio de que la humedad tiende a migrar hacia el medio más seco disponible. En este proceso, el vapor de agua se elimina del aire comprimido al pasarlo sobre un material desecante adsorbente. El aire comprimido saturado ingresa al sistema a través de un prefiltro, donde se elimina el agua líquida y otros gases contaminantes. A continuación, el aire pasa a través del secador, donde la humedad es adsorbida por el desecante a medida que el aire fluye por la cámara. La adsorción es un proceso exotérmico, lo que significa que libera calor. Este calor es luego utilizado para ayudar en el proceso de regeneración del desecante (Figura 2-29. tomado de VAPS Technologies).

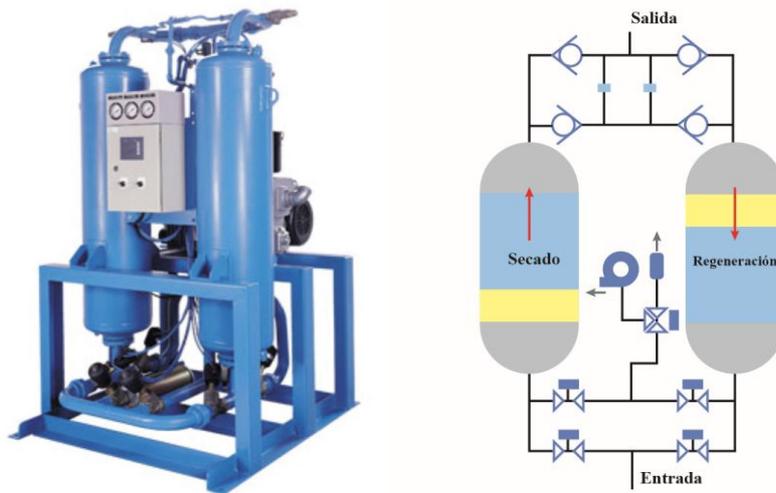


Figura 2-29. Secador VPS sin calor de purga al vacío

Durante el ciclo de operación, el aire comprimido seco sale a través de una válvula de salida y posteriormente pasa por un filtro posterior. Mientras una cámara está en el ciclo de secado, la otra cámara se despresuriza a la atmósfera. Una parte del aire seco se mide a través de una válvula de purga, se expande a presión de vacío y pasa a través del lecho de desecante húmedo en contraflujo al flujo de secado. Este aire de purga, que es extremadamente seco y contiene el calor de adsorción acumulado durante el ciclo de secado, se utiliza para regenerar el lecho desecante (*VPS Vacuum Heatless Dryer – VAPS Technologies, n.d.*). La figura Figura 2-30 muestra un resumen del modelo.

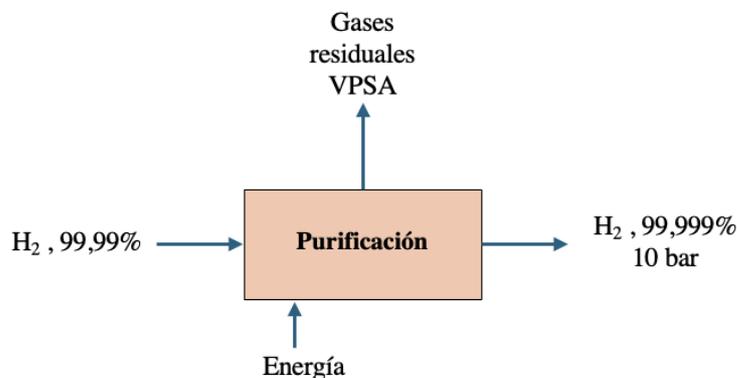


Figura 2-30. Purificación de hidrógeno

2.5.2.6 Compresión

El hidrógeno para transporte y uso en celdas de combustible se suele almacenar a altas presiones para maximizar la densidad de energía y facilitar su manejo. Uno de los compresores más usados en la compresión de Hidrógeno es el de diafragma. El diafragma se mueve de forma recíproca en respuesta a la presión aplicada en la cámara de presión, comprimiendo así el hidrógeno en la cámara opuesta y elevando su presión a los niveles requeridos para su almacenamiento o uso. Este diseño asegura que el hidrógeno comprimido mantenga su pureza, alcanzando niveles de hasta un 99.999% (Orlova et al., 2023).

El cilindro de compresión es el cuerpo principal del compresor donde se realiza el proceso de compresión. Aquí, dos cámaras están separadas por un diafragma flexible, y el gas se comprime

sin riesgo de contaminación. El diafragma es fabricado con materiales altamente resistentes a la corrosión y a la permeación del hidrógeno, como acero inoxidable o PTFE, actúa como una barrera efectiva que impide la fuga del hidrógeno y evita la entrada de contaminantes externos. Las válvulas de entrada y salida controlan el flujo del hidrógeno hacia y desde el compresor. Estas válvulas aseguran que el gas fluya correctamente durante el proceso de compresión, manteniendo la integridad del sistema (Minnuo Compressors, 2022). Un resumen del modelo se muestra en la Figura 2-31.

Dado que la compresión de hidrógeno genera calor, se incluye un sistema de enfriamiento para disipar este calor, protegiendo los componentes internos y garantizando un funcionamiento continuo sin sobrecalentamientos.

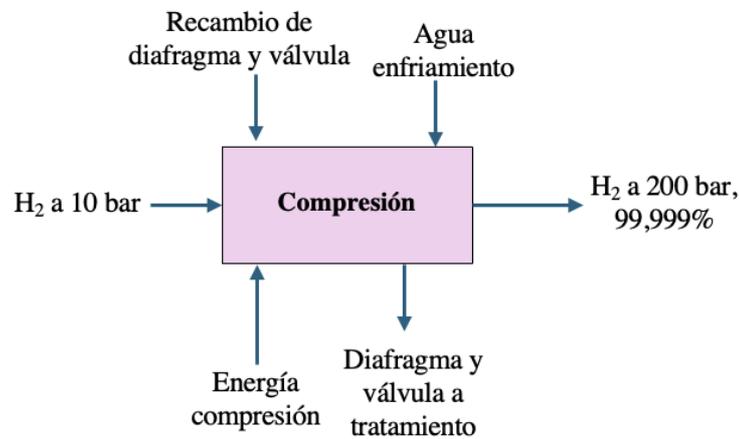


Figura 2-31. Compresión de hidrógeno

La Figura 2-32 muestra el resumen de los procesos en la producción de hidrógeno con electrolizadores alcalinos. Se han representado de modo general entradas y salidas a los límites del sistema.

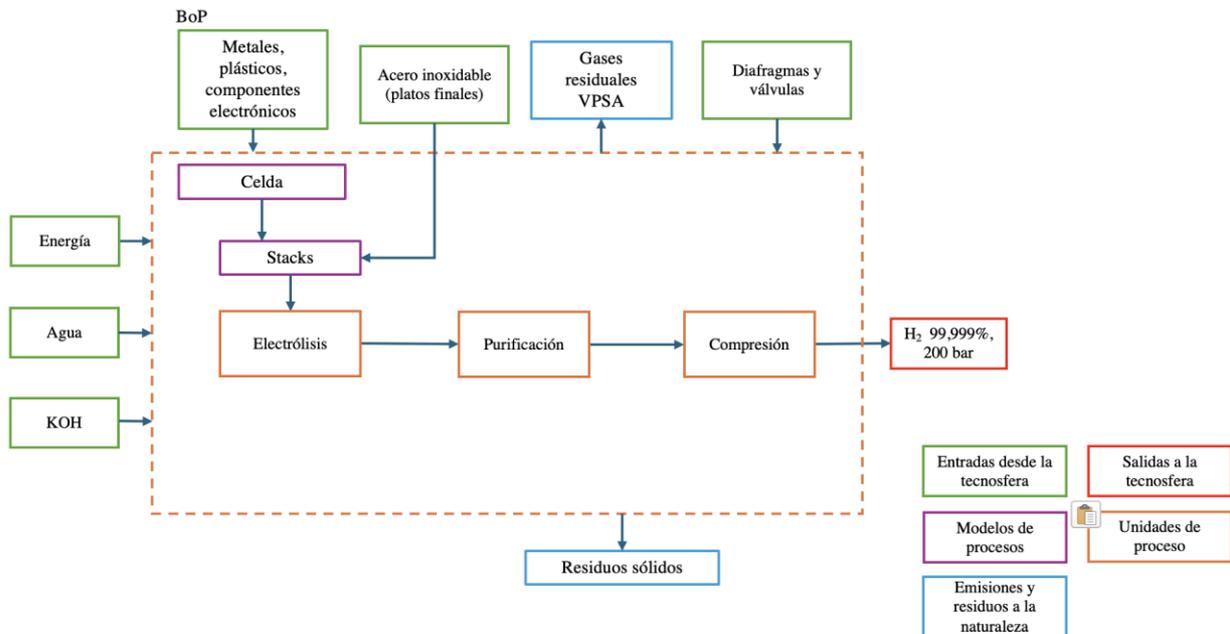


Figura 2-32. Diagrama de procesos hidrógeno producido por electrólisis Alcalina

2.5.3 Electrólisis de intercambio de protones

También conocida como electrólisis de electrolito de membrana polimérica (PEM), se diferencia de la electrólisis alcalina, por prescindir de electrolito líquido. En su lugar, utiliza una membrana de polímero hermética al gas. La membrana más comúnmente empleada es el producto comercial Nafion (Smolinka, 2015). La conexión de células individuales, formando stacks, se realiza exclusivamente en serie (electrolizador bipolar) (Figura 2-27).

Debido a la falta de un electrolito líquido no requiere todo el equipo asociado al mismo (bombas, separación de gases, etc). Un electrolizador PEM permite un diseño de sistema más compacto. Su principal diferencia con la electrólisis alcalina es que se puede obtener el hidrógeno a altas presiones y con una mejor eficiencia ya que las celdas tienen mayor eficiencia y densidad de corriente. (Guilera et al., 2020).

La pureza del hidrógeno obtenido suele superar el 99,999%, sin requerir equipos adicionales de purificación.

2.5.3.1 Fabricación de la celda PEM

A nivel de celda, en el ánodo, el agua se somete a una oxidación que da lugar a la producción de oxígeno, electrones y protones (IRENA, 2020). Estos protones atraviesan la membrana, dirigiéndose hacia el cátodo. Los electrones salen del ánodo a través del circuito externo de energía, que proporciona la fuerza motriz (voltaje de la celda) para la reacción. En el lado del cátodo, los protones y electrones se recombinan para producir hidrógeno (Figura 2-33).

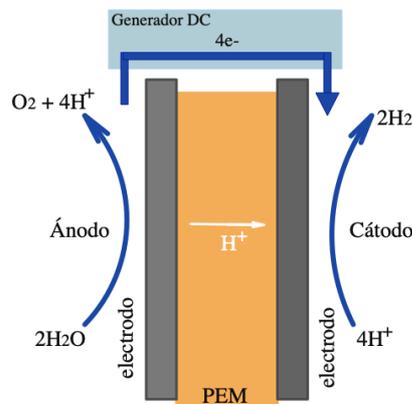


Figura 2-33. Celda electrólisis PEM

Las reacciones que tienen lugar en el ánodo (2-14) y el cátodo (2-15) son:



Las dos semiceldas están separadas por la PEM, que transporta protones durante la reacción y bloquea el paso del gas producido. Los catalizadores se aplican directamente sobre la membrana

formando el componente clave de las celdas, es decir, la unidad de ensamblaje de membrana-electrodo (MEA).

Dos capas de transporte poroso (también conocidas como GDL) están intercaladas a ambos lados de la MEA. Las placas bipolares (también conocidas como BPs) encapsulan las dos semiceldas, actuando como medio de transferencia de carga, masa y calor, y establecen el contacto con la fuente de alimentación externa.

Los productos de hidrógeno y oxígeno pasan a través de la superficie del catalizador, la GDL y las BPs sucesivamente para salir de las celdas. Además, las semiceldas también deben complementarse con algunos elementos de sellado para evitar fugas de gas y agua (Figura 2-34).

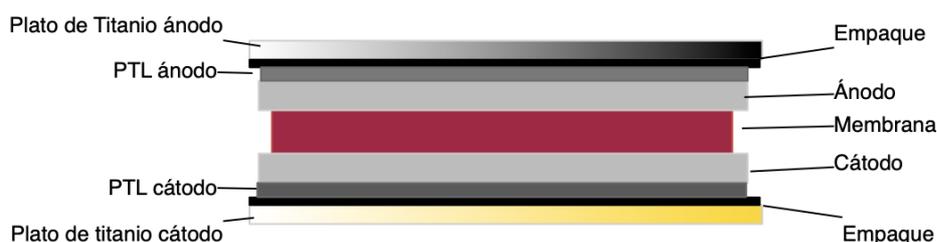


Figura 2-34. Configuración de una celda PEM, elaboración propia

2.5.3.1.1 MEA

El MEA está compuesta por la membrana, la solución de ionómero y los electrocatalizadores del ánodo y cátodo, como se muestra en la Figura 2-35 (*Technology - Hydron Energy, n.d.*).

La membrana es la columna vertebral de la celda PEM; La membrana tiene una columna vertebral hidrofóbica similar al Teflón y cadenas laterales hidrofílicas de ácido sulfónico. Dependiendo del peso equivalente (EW), la química y la longitud de la cadena lateral, los PFSA pueden dividirse en diferentes membranas, como nafion, aciplex, flemion, 3M y de cadena lateral corta (SSC). Entre ellas, las membranas de la serie nafion fabricadas por DuPont son una categoría representativa. Nafion 117, 115 y 112 son las membranas más utilizadas en esta serie, y los diferentes números representan diferentes pesos equivalentes y grosores. Las membranas más comúnmente utilizadas son las de polímero de ácido perfluorosulfónico, como Nafion® de un determinado espesor (Liang et al., 2022).

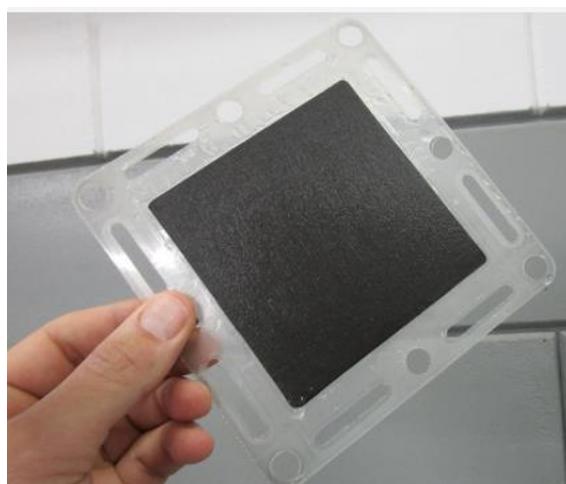


Figura 2-35. Conjunto membrana catalizadores (MEA)

La preparación de los electrodos de membrana también es una parte importante en la construcción de un electrolizador. La configuración más utilizada por los fabricantes para el MEA es la de membrana recubierta con catalizador (CCM) como se ve en la Figura 2-36.

En el método CCM, una tinta de catalizador que contiene Nafion se extiende sobre un soporte de teflón y luego se transfiere a la membrana de intercambio protónico mediante prensado en caliente (Shiva Kumar & Himabindu, 2019).

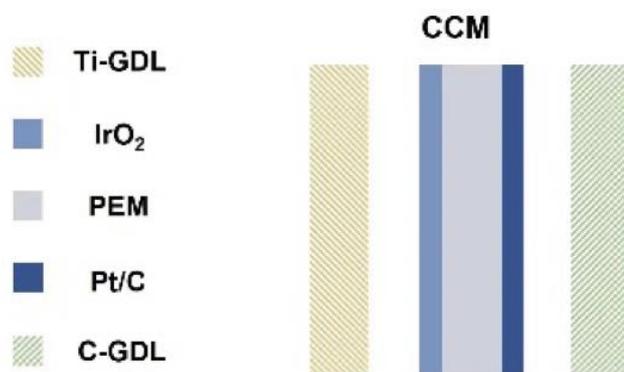


Figura 2-36. Estructura química de la membrana PEM

La tinta de catalizador se prepara mezclando el catalizador dispersado sobre carbono negro en un determinado porcentaje, junto con Nafion solubilizado para proporcionar un contacto más íntimo entre la membrana de electrolito polimérico y los cúmulos de catalizador (Firtina et al., 2011). La tinta se mezcla puede mezclarse con agua, alcohol isopropílico y propilenglicol para darle viscosidad y tensión a la mezcla (Kumar, 2022). Una estructura óptima de la capa catalítica debe contener una cantidad adecuada de cada material hasta una carga óptima dada en mg/cm^2 sobre el área activa (Kumar, 2022).

El método más utilizado para cubrir la membrana de ionómero con la tinta de catalizador es el método de recubrimiento por rodillo (Roll-to-Roll o R2R). Este método clasificado como un proceso de impresión 2D, aplica una capa continua de tinta de catalizador sobre la membrana de ionómero utilizando rodillos, lo que permite una producción en masa eficiente (J. Park, 2020). El consumo energético depende de la velocidad de impresión (m/min) y la tecnología de aplicación de tinta (spray coating, inkjet printing o screen printing) (Paixão da Costa et al., 2024). La Figura 2-37 muestra el modelo de la preparación de la MEA.

La función de la MEA es formar una interfase de triple fase con una mayor área de reacción para el transporte de protones y electrones. Tradicionalmente como catalizadores se utilizan metales preciosos basados en óxidos de iridio y rutenio para el ánodo y platino para el cátodo, respectivamente (Mittelsteadt et al., 2015).

En el proceso de CCM (Figura 2-37), la membrana de nafion se va desenrollando de un rollo en la impresora y se va aplicando hasta obtener la cantidad deseada de catalizador, después la membrana se seca y se cura térmicamente (Liang et al., 2022).

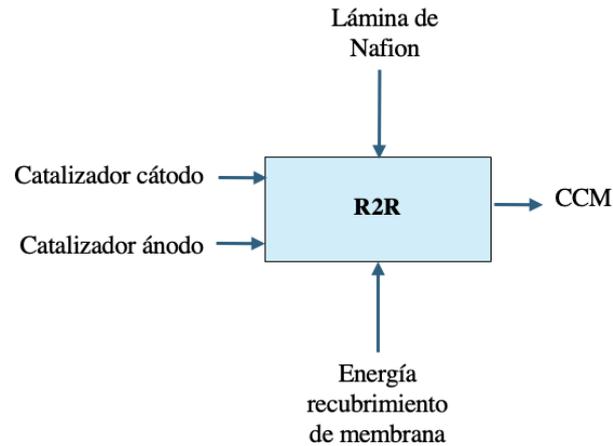


Figura 2-37. Preparación de membrana MEA por método CCM

2.5.3.1.2 Colectores de corriente o PTL o GDL

La capa de difusión de gas (GDL) es un medio poroso ubicado entre la membrana de intercambio de protones (PEM) y las placas bipolares (BPs). Su función principal es proporcionar soporte mecánico a la membrana y facilitar el transporte eficiente de fluidos.

La GDL generalmente está compuesta de materiales de carbono (como papel de carbono y tela de carbono) en el cátodo o materiales metálicos (como titanio y acero inoxidable). En el ánodo de la celda PEM, se utilizan formas porosas de titanio, como mallas, fieltros, espumas o polvos sinterizados, debido a su resistencia a la corrosión y alta conductividad eléctrica.

El titanio, sin embargo, puede degradarse por pasivación de su superficie fragilización por el hidrógeno Figura 2-38. Por lo que para mitigar estos efectos y aumentar la durabilidad, las placas de titanio suelen recubrirse con metales preciosos, como Au o Pt, Este recubrimiento suele hacerse mediante procesos de deposición como sputtering, electrodeposición, o baño electrolítico (Caplinq, n.d.).

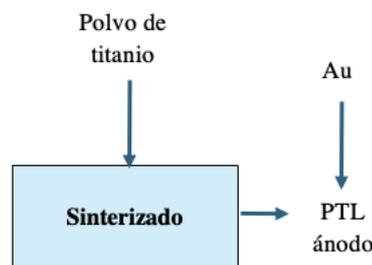


Figura 2-38. Producción de PTL para el ánodo PEM

2.5.3.1.3 Platos bipolares

Los platos bipolares (BPP) actúan como un puente eléctrico entre celdas adyacentes y ayudan a mantener la integridad del sistema eléctrico. Además, suministran y remueven reactivos (es decir, agua) y productos gaseosos (es decir, H_2 y O_2). Estas funciones deben mantenerse bajo condiciones de alta presión, oxidación (ánodo) y reducción (cátodo) en el entorno operativo de la celda electrolítica. Estas características requieren que los BPPs sean altamente conductivos, resistentes

a la corrosión, impermeables, de bajo costo y con suficiente resistencia mecánica (Liang et al., 2022).

Los BPPs son la base de las celdas de combustible, representan el 80% del peso de una celda de combustible. Los materiales actualmente utilizados se dividen en dos categorías: materiales metálicos recubiertos y materiales de grafito. Dependiendo de la selección de materiales, se pueden utilizar varios métodos de fabricación. Los métodos convencionales para fabricar BPPs metálicas incluyen forjado de metales en polvo, estampado e hidroformado, mientras que los métodos tradicionales utilizados para BPPs de grafito incluyen moldeo por compresión e inyección, directamente relacionados con la durabilidad del stack.

El grafito es el material tradicional preferido para las BPPs debido a su excelente resistencia química y buena estabilidad térmica. Varios tipos de compuestos de grafito-polímero disponibles comercialmente consisten en termoplásticos como PP (polipropileno), sulfuro de polifenileno (PPS) y fluoruro de polivinilideno (PVDF). El grafito puro no es un material adecuado para la producción de BPPs, pero las propiedades deseadas del grafito pueden aprovecharse en combinación con otros aditivos como resinas poliméricas o rellenos de carbono para fabricar placas compuestas de grafito. En los compuestos de grafito-polímero, el polvo de grafito, el aglutinante polimérico y otros aditivos se mezclan y granulan continuamente.

Debido al alto potencial del ánodo y la naturaleza ácida de la membrana de intercambio de protones los BPPs de titanio suelen recubrirse o usarse aleaciones para proteger las placas de titanio con metales preciosos o metales del grupo del platino. Dichos recubrimientos se realizan mediante pulverización por plasma en vacío (VPS) o por deposición física de vapor (PVD) (senzahydrogen, n.d.). Otro material para los BPPs metálicos es el acero inoxidable 304, este normalmente se recubre con un material protector contra la corrosión mediante deposición física de vapor (PVD). El stack de 1 kW (Tang et al., 2021). No se considera un proceso intensivo en energía.

2.5.3.1.4 Juntas de sellado

Las juntas de sellado se ponen entre la MEA y las placas bipolares para garantizar el sellado y una presión adecuada. También se ponen juntas de sellado antes de los platos finales. Pueden ser de materiales como teflón, Viton, EPDM y goma de nitrilo, de diferente grosor y adaptado a la geometría de las celdas, los sellos suelen tener dimensiones que coinciden con el área periférica de la celda y los canales de flujo en las placas bipolares, con un grosor que varía según el material y las necesidades de compresión para asegurar un sellado hermético (Moreno Soriano et al., 2021).

2.5.3.2 Integración de Stacks PEM

Para aumentar la tasa de producción de hidrógeno, varias celdas individuales se conectan eléctricamente en serie Figura 2-39 (IRENA, 2020). Las celdas están compuestas por el conjunto de electrodos y membrana (MEA, por sus siglas en inglés) sujeta entre las capas de transporte porosas (PTL) y las placas bipolares. Las celdas se unen para conseguir la potencia deseada. A ambos lados del stack se ponen sellos y se cierra con platos finales o platos de compresión, estos suelen ser de aleaciones de aluminio (senzahydrogen, n.d.). Los platos finales soportan la carga mecánica completa aplicada en la pila a través de pernos de sujeción y proporcionan una distribución uniforme y óptima de la presión entre los diversos componentes de la pila (Smolinka, 2015).

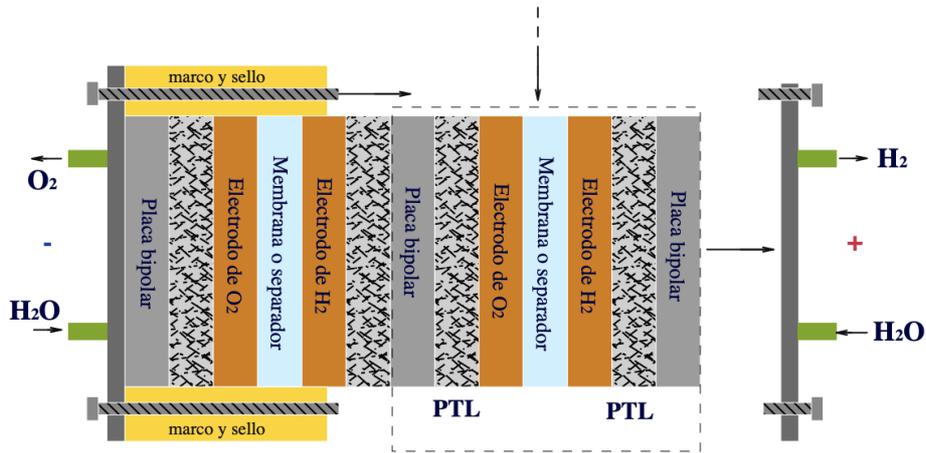


Figura 2-39. Estructura del stack PEM

Un stack tiene un área activa igual a la suma de las áreas activas de todas las celdas individuales (N) en él. Si cada celda tiene un área activa A_{celda} (2-5), la del stack será:

$$A_{stack} = N \times A_{celda} \quad (2-16)$$

Se pueden ensamblar más de 150 celdas por stack (Krishnan et al., 2023). El stack tiene tiempo de vida en el que es operativo y eficiente.

2.5.3.3 Ensamble del sistema con los Stacks

Cuando se suministra energía al stack, se generan gases de hidrógeno y oxígeno. El oxígeno se pasa a través de un separador de fase de O_2 , donde se separa y el agua se devuelve a la unidad de manejo de agua desionizada. Desde allí, utilizando una bomba de agua de baja presión, se inyecta agua desionizada en el stack (Figura 2-40).

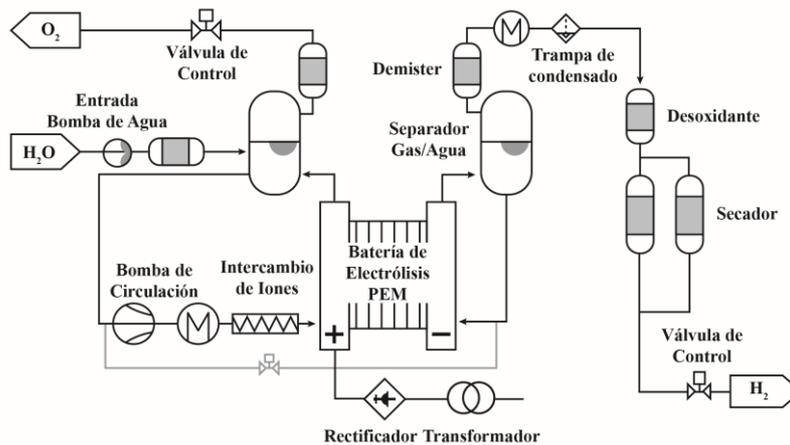


Figura 2-40. Esquema de balance de planta PEM

En cuanto a la línea de hidrógeno, este se pasa a través de un separador de fase gaseosa de hidrógeno. El separador de fase gaseosa de H_2 elimina el agua que es transportada durante el proceso de electrolisis. Desde el separador, el hidrógeno fluye hacia un demister, donde se eliminan las últimas trazas de humedad y a través de un intercambiador de calor, que enfría el gas antes de que llegue a una trampa de condensados, donde se elimina cualquier condensado residual. Posteriormente, el hidrógeno se dirige a un deoxidizer, que elimina cualquier traza de

oxígeno. A continuación, el hidrógeno pasa por un secador de hidrógeno para garantizar su pureza. Su salida es regulada por una válvula de control (Reyes, 2022). A lo largo de toda la línea de hidrógeno, el agua residual se recoge y se reutiliza (Mittelsteadt, 2015).

En resumen, el stack junto con los dispositivos del BoP forman el electrolizador Figura 2-41.

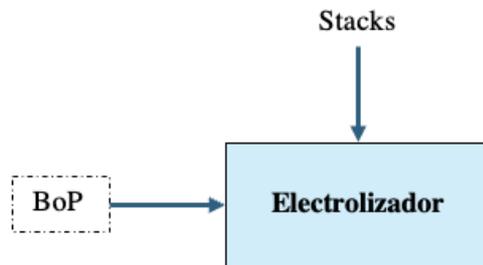


Figura 2-41. Construcción de electrolizador PEM

2.5.3.4 Electrólisis

Los módulos de los electrolizadores PEM tienen una configuración bipolar en la que la conexión eléctrica entre las celdas se realiza mediante placas bipolares, así que el voltaje del módulo V_m es igual a la suma de los voltajes conectados. La presencia de la membrana polimérica limita las temperaturas de electrólisis a valores generalmente por debajo de 80 °C debido al carácter compacto de los módulos de electrólisis, así como a las propiedades estructurales de los ensamblajes de electrodos de membrana (MEA), los cuales pueden soportar grandes diferencias de presión entre los compartimentos de los electrodos.

La pureza del hidrógeno es superior a la de los electrolizadores alcalinos, es típicamente superior al 99.99% en volumen sin necesidad de equipo auxiliar en volumen sin necesidad de equipo auxiliar. La baja permeabilidad gaseosa de las membranas poliméricas reduce el riesgo de formación de mezclas inflamables; por lo tanto, es permisible operar a densidades de corriente muy bajas. Sin embargo, los electrolizadores PEM presentan una vida útil más corta que la tecnología alcalina (Ursúa et al., 2011).

2.5.3.5 Compresión

La compresión se realiza en una sola etapa, desde la presión en la salida del electrolizador (30 bar) hasta 200 bar. Los compresores de diafragma se utilizan principalmente en la compresión de hidrógeno de alta pureza, y están dentro del grupo de compresores de desplazamiento positivo porque el gas se desplaza en una cámara. Ver 2.5.2.6. La Figura 2-43 describe el modelo.

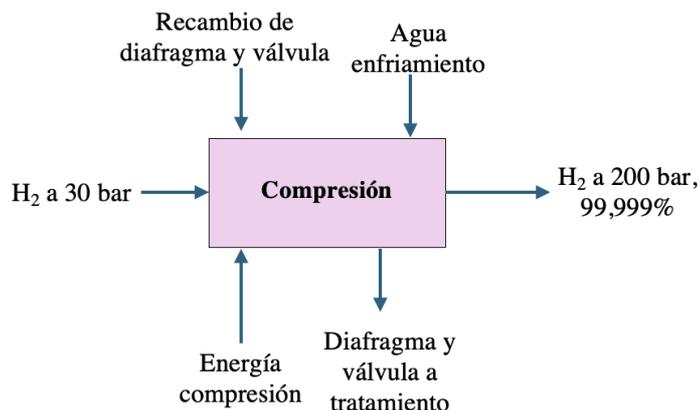


Figura 2-42. Compresión de H₂ desde 30 bar a 200 bar en compresor de pistón

2.6 FIN DE VIDA

Para analizar el fin de vida de los electrolizadores, una aproximación sería tener en cuenta únicamente los materiales del grupo platino PGM por su relevancia económica y escasez, sin embargo, este estudio no cubre esta etapa porque habría que hacer una gran cantidad de suposiciones ya que la información encontrada de artículos científicos. Además de la ruta de procesos de fin de vida no se tienen datos.

Los procesos usados para su recuperación son hidrometalúrgicos o pirohidrometalúrgicos (Valente et al., 2019). Los electrolizadores de agua alcalina son fiables y seguros, y presentan una vida útil que puede alcanzar hasta 15 años. La mayoría de los fabricantes producen módulos bipolares. Y el producto de mayor interés son los catalizadores Raney (basados en níquel) por su peligrosidad. El proceso hidrometalúrgico es el que tiene menor costo y requerimientos energéticos más favorables. En un escenario a corto plazo un gestor de residuos transportaría los stacks y realizaría la recuperación de materiales, de energía, y la disposición final. La Figura 2-43 muestra una adaptación de los procesos de fin de vida simplificada adaptada de Valente et al., 2019; en esta representación las líneas corresponden a proceso de transporte.

El camino hidrometalúrgico implica la disolución de elementos objetivo a partir de matrices sólidas mediante ataques cáusticos o ácidos. Este paso generalmente es seguido por una separación a través de precipitación, extracción con disolventes, destilación, intercambio iónico, cementación o filtración. Requieren un pretratamiento mecánico para aumentar la superficie activa expuesta a los reactivos, un gran volumen de soluciones y la generación de aguas residuales, que pueden ser corrosivas y/o tóxicas.

Por otro lado, para recuperar catalizadores de metales preciosos (PGM) se requieren proceso de pretratamiento, lixiviación, separación y purificación e involucrar subprocesos adicionales, como la regeneración de disolventes. La eficiencia de estos procesos determina la eficiencia de la recuperación. Los agentes de lixiviación más usados son ácidos fuertes y oxidantes como HCl mezclado con HNO₃ en relación molar 3:1 para la recuperación de PGM de catalizadores. En el caso del Pt, se separa proceso de resina de intercambio aniónico seguido por desorción de la resina. Para precipitar platino en forma de (NH₄)₂PtCl₆, la corriente rica en Pt proveniente del proceso de separación se trata con NH₄Cl, se filtra y el Pt se recupera en forma sólida.

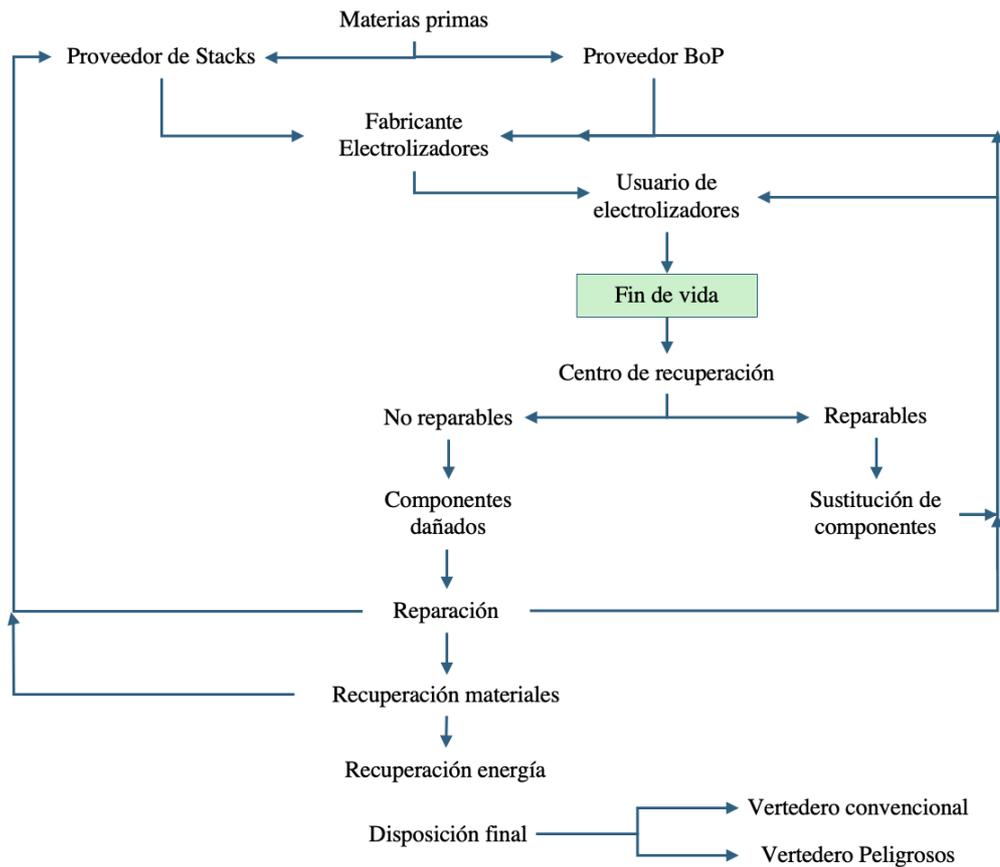


Figura 2-43. Procesos de Fin de Vida, Electrólisis

Se puede añadir un paso de ignición a 350 °C para obtener Pt de alta pureza (99.9%). Los resultados experimentales reportan una eficiencia de recuperación de Pt de hasta 76%. Este mismo $(\text{NH}_4)_2\text{PtCl}_6$ se podría usar con polvo de carbono para generar nueva tinta de electrodos, al cambiar los agentes de lixiviación, esta familia de procesos podría utilizarse para la recuperación Raney-Ni y plata en los electrolizadores alcalinos (Valente et al., 2019). Un modelo del proceso de recuperación de Ni o PGM se resume en la Figura 2-44.

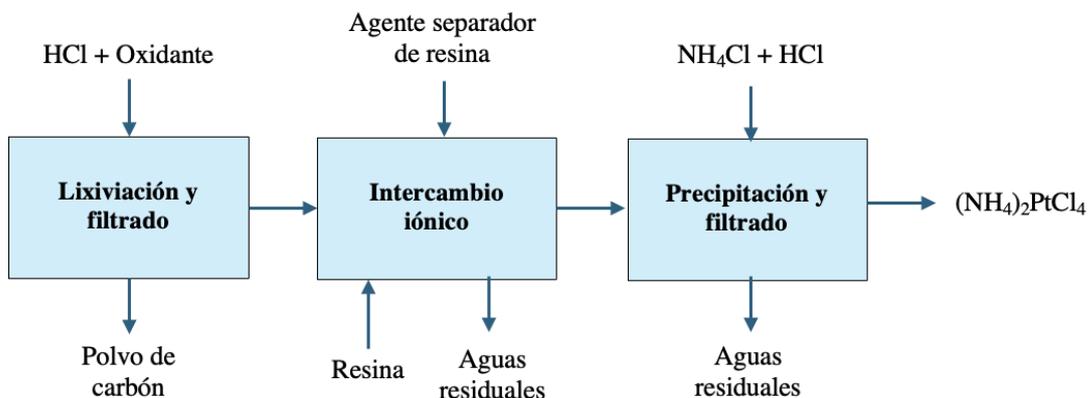


Figura 2-44. Recuperación de PGM o Ni de celdas de electrólisis

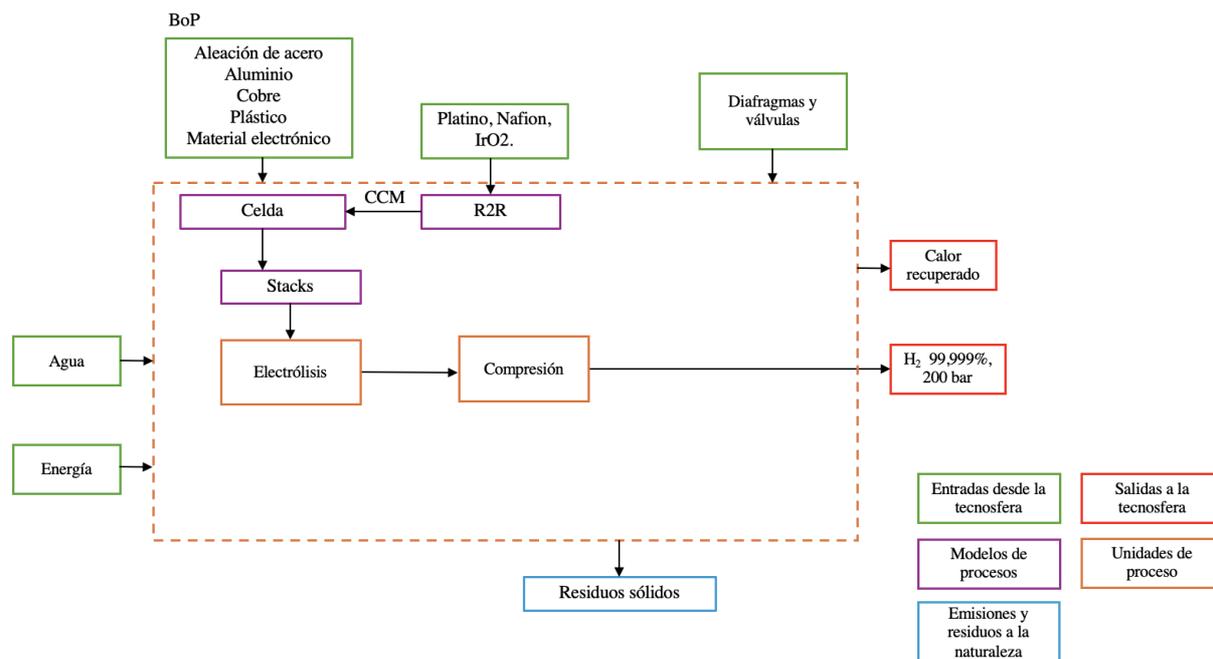


Figura 2-45. Diagrama de procesos hidrógeno producido por electrólisis PEM

2.7 Procedimiento de asignación

El oxígeno es un coproducto generado en el proceso de electrólisis, sin embargo, usualmente se ventila y no se utiliza más, por lo que el sistema no contiene ninguna multifuncionalidad.

2.8 Categorías de impacto y metodología de evaluación

Las categorías de impacto proporcionan información para evaluar la magnitud y el significado de los posibles impactos ambientales. Traducen las entradas y salidas en indicadores de impacto relacionados con la salud humana, el entorno natural y la degradación de recursos. Una categoría de impacto es una clase que representa las consecuencias ambientales generadas por los procesos, y los métodos de evaluación del impacto ambiental se clasifican según el efecto último del impacto ambiental como de punto medio o de punto final. Las categorías de punto medio implican modelar el impacto utilizando un indicador a lo largo de los mecanismos, pero no hasta el resultado final. Algunos ejemplos incluyen el potencial de calentamiento global, el potencial de acidificación, el potencial de eutrofización, el potencial de formación de ozono fotoquímico, la toxicidad para los seres humanos, la radiación ionizante, la ecotoxicidad, el uso del suelo, la huella hídrica y el agotamiento de recursos (A. Lozanovsk, 2011).

Por otro lado, los métodos de evaluación de punto final requieren modelar todo el camino hasta el impacto en la salud humana, el medio ambiente y las fuentes de recursos. Son más fácilmente comprendidos debido a su conexión con los aspectos de interés para la sociedad, pero suelen presentar una mayor incertidumbre en el modelado desde el punto medio hasta el punto final, lo que constituye su principal desventaja. Los métodos de punto medio están alineados con las políticas ambientales y pueden ser modeladas con mayor precisión.

La metodología de impacto ambiental utilizada en este trabajo es ReCiPe, la cual se fundamenta en una estructura jerárquica de categorías de impacto y factores de caracterización. Cada categoría

de impacto precisa de una representación cuantitativa denominada indicador de categoría, ej emisión de ácido equivalente (European Commission, 2011).

Las categorías de impacto se seleccionaron teniendo en cuenta los objetivos políticos europeos y los mismos resultados del estudio. El Parlamento Europeo presentó su Octavo Programa de Acción Climática en 2022, estableciendo prioridades en la adaptación al cambio climático, la eliminación de la contaminación, la protección y restauración de la biodiversidad, así como la reducción de los impactos ambientales claves relacionados con la producción y el consumo (EUROPEAN PARLIAMENT, 2022), a continuación, se desglosan categorías que abordan estos temas.

2.8.1 Potencial de calentamiento global

Es la categoría globalmente aceptada para describir el cambio climático asociado a la producción del portador de energía, en este caso el metano o la energía renovable, el transporte hasta la instalación de producción de hidrógeno y la conversión mediante el proceso de electrólisis o reformado. Se expresa en kg de CO₂ equivalentes (A. Lozanovsk, 2011).

2.8.2 Radiación ionizante

Se refiere a radiación cuya exposición en humanos causa alteraciones en ADN conllevando a la aparición de enfermedades como cáncer o malformaciones (Steinmann & Huijbregts, n.d.). La capacidad de las ondas electromagnéticas para ionizar átomos o moléculas al desprender electrones de ellos, expresada en kBq Co-60 eq. (*Ionising Radiation (KBq Co-60 Eq) | HESTIA*, n.d.)

2.8.3 Potencial de Eutrofización

Indicador de enriquecimiento excesivo del ecosistema de agua dulce con nutrientes. Debido a la emisión de compuestos de fósforo y nitrógeno. Generalmente causada por el uso de fertilizantes en la agricultura, pero también por procesos de combustión. Relacionado con el crecimiento excesivo de algas en las masas acuosas, la falta de oxígeno y la muerte de especies acuáticas. La unidad de EP es kg de PO₄-equivalente (Dcycle, n.d.)

2.8.4 Uso del suelo

Indicador de la utilización y transformación de tierras con potencial agrícola para otros fines. Debido a la ocupación por bosques, carreteras, zonas industriales, extracción de minerales, entre otros. También conocido como uso de la tierra | ocupación de tierras agrícolas. La unidad es m² eq. de cultivo (Dcycle, n.d.). Esta categoría no se evalúa por falta de datos fiables para la comparativa.

2.8.5 Ecotoxicidad y potencia de toxicidad humana

La emisión de sustancias como los metales pesados impacta en la salud humana. Las evaluaciones de toxicidad se basan en concentraciones tolerables en el aire y el agua, pautas de calidad del aire, ingesta diaria tolerable y dosis diaria aceptable para toxicidad humana. Los factores de caracterización se expresan como Potenciales de Toxicidad Humana (HTP, por sus siglas en inglés), Para cada sustancia tóxica, los HTP se expresan utilizando la unidad de referencia, kg equivalente de 1,4-diclorobenceno (1,4-DB) (*Human Toxicity : BRE Group*, n.d.)

2.8.6 Uso del agua

La extracción de agua de lagos, ríos o aguas subterráneas puede contribuir al agotamiento del agua disponible. La categoría de impacto considera la disponibilidad o escasez de agua en las regiones donde se desarrolla la actividad, si se conoce esta información. El impacto potencial se expresa en metros cúbicos (m³) de uso de agua relacionada con la escasez local de agua (Ministerio de Consumo/EC-JRC, Sostenibilidad del consumo en España, 2022).

2.8.7 Agotamiento de recursos abióticos

La esencia subyacente de esta categoría de impacto en el análisis de ciclo de vida, relacionada con el uso de recursos minerales y metales, se relaciona con el impacto de extraer recursos en cantidades significativas en la actualidad podría conllevar a que las futuras generaciones deban extraer recursos con concentraciones más bajas o de menor valor. (Ministerio de Consumo/EC-JRC, Sostenibilidad del consumo en España, 2022). En este estudio la escasez de recursos minerales se calcula convirtiendo las cantidades de minerales a la cantidad equivalente de cobre (kg Cu eq).

2.9 Requisitos relativos a los datos

Los datos primarios serán obtenidos de especificaciones técnicas de plantas de reformado y plantas de electrólisis. Los datos secundarios de consumo de energía y materiales para los subprocesos obtenidos de literatura científica, de fichas técnicas si se encontrase o tomados de los procesos modelados en SimaPro. Tomando como prioridad recopilar datos primarios para el foreground. Los indicadores de calidad de datos a usar serán de acuerdo con la metodología adaptada por (CCalC2©, 2016):

- Representatividad tecnológica
- Representatividad geográfica
- Representatividad relativa al tiempo
- Precisión y exactitud
- Completitud
- Consistencia
- Reproducibilidad
- Fuentes de datos (primario o secundario)

La calidad de los datos puede ser alta, media o baja y los criterios para determinarlo se resumen en la Tabla 2-1. La Tabla 2-2 muestra como estas se combinan para obtener un indicador de calidad de datos (DQI) alto, medio, o bajo. A cada criterio de calidad se le asigna un peso del 1-10. Aplicando los pesos de importancia para cada criterio y su máximo puntaje para los indicadores de calidad respectivos, el máximo puntaje para cada indicador de calidad es:

- 30 para alto,
- 20 para medio, y
- 10 para bajo.

Para los propósitos del análisis, se adoptan los siguientes rangos de puntajes para el aseguramiento de calidad de los datos:

- Datos de calidad baja: puntajes en el rango de 1-10,
- Datos de calidad media: puntajes en el rango de 11-20, y
- Datos de calidad alta: puntajes en el rango de 21-30

Tabla 2-1. Matriz de indicadores de calidad de datos (DQI)

Criterio de calidad	Alto	Medio	Bajo
Antigüedad de los datos	< 5 años	5-10 años	>10
Origen geográfico de los datos	Específico	Parcialmente específico	Genérico/promedio
Fuente de datos	Medidos o modelados basados en datos específicos	Modelados usando bases de datos de ACV	de la literatura y/o estimado usando conocimiento experto
Compleitud de los datos	Se consideran todas las entradas y salidas	Se consideran la mayoría de los inputs y outputs	se consideran algunas entradas y salidas
Reproducibilidad y consistencia de los datos	Completamente reproducible y consistentes	Parcialmente reproducibles y consistentes	No reproducibles

Tabla 2-2. Ponderación de indicadores de calidad de datos (DQI)

Criterio de calidad	Peso de cada criterio en una escala del 1-10	Alta calidad Máximo puntaje por criterio: 3	Media calidad Máximo puntaje por criterio: 2	Baja calidad Máximo puntaje por criterio: 1
Antigüedad de los datos	2	3	2	1
Origen geográfico de los datos	1	3	2	1
Fuente de datos	3	3	2	1
Compleitud de los datos	2	3	2	1
Reproducibilidad y consistencia de los datos	2	3	2	1
Máximo puntaje		30 (máximo puntaje) Alto en el rango de: 21-30	20 (máximo puntaje) Medio en el rango de: 11-20	10 (máximo puntaje) Bajo en el rango de: 1-10

2.10 Suposiciones y Limitaciones

A grandes rasgos las suposiciones se pueden organizar en los siguientes grupos:

Consideración de operaciones de fin de vida

No se han considerado las operaciones de fin de vida del sistema en su totalidad, pero sí se han tenido en cuenta los tratamientos y la gestión de los residuos generados durante la fase de uso, especialmente aquellos provenientes de los mantenimientos, como el reemplazo de componentes

clave (por ejemplo, diafragmas y válvulas, recambio de stacks y recuperación de algunos metales en los electrolizadores).

Carencia de datos sobre sistemas de compresión

Uno de los principales desafíos en el análisis ha sido la falta de datos precisos sobre los sistemas de compresión, particularmente para alcanzar los caudales de hidrógeno. Se hicieron suposiciones generalizadas respecto a estos valores, lo que implica una falta de certeza en las eficiencias de los sistemas de compresión y en la cantidad de energía en forma de calor que se puede recuperar, un dato crítico para la evaluación de la eficiencia del sistema. Esta misma falta de datos afecta la estimación del consumo de agua en el proceso.

Escenarios de mantenimiento simplificados

Para simplificar el análisis, se asumió que el mantenimiento se centraba en las partes más críticas del sistema, como los diafragmas y las válvulas en el compresor, y cambio de stacks en los electrolizadores. Esto implica que otros componentes menos críticos no fueron considerados.

Suposiciones en el reformado catalítico

En el proceso de reformado catalítico, se asumió que el calor necesario para elevar la temperatura de reformado se aportaba completamente mediante electricidad y que este era de 4 kWh/kgH₂, aunque en la práctica este calor se obtiene principalmente quemando gas natural. Además, se supuso que la recuperación de vapor se realiza de manera eficiente, sin pérdidas, dado que no se encontró información que indicara lo contrario. También se asumió que todo el gas residual del PSA se envía al reformador disminuyendo a 0.7 kWh/kg la energía necesaria para elevar la temperatura.

Rendimiento de las distintas etapas

Durante el proceso de producción de hidrógeno, se asumieron ciertos rendimientos en las etapas de conversión y captura de CO₂, basados en datos disponibles y simplificaciones del modelo. Estos supuestos se detallan en el análisis del inventario.

Suposiciones sobre el Balance de Planta (BoP)

Se realizaron suposiciones significativas sobre los materiales utilizados y las cantidades en el Balance de Planta (BoP), que incluyen elementos como equipos, materiales de construcción y componentes auxiliares. Los datos se compararon con los reportados por otras fuentes, pero estos incluso tampoco tienen mucho background.

Purificación VPSA

Se asumió que el sistema de purificación VPSA, al operar a bajas temperaturas y presiones, tiene un requerimiento mínimo de enfriamiento. Por lo tanto, no se consideró el impacto de los sistemas de enfriamiento en el inventario, dada esta suposición.

Limitaciones de la información sobre el electrolizador

Como el objetivo principal es realizar un análisis de ciclo de vida y no el diseño, se recurrió a información disponible de proveedores, complementada con datos de literatura técnica. No obstante, algunos detalles específicos no fueron accesibles debido a restricciones de patentes o confidencialidad de ciertos datos, lo que representa una limitación importante en la calidad y precisión de la información obtenida.

3 ANÁLISIS DEL INVENTARIO

Para evaluar el impacto ambiental del suministro de hidrógeno en una economía de hidrógeno completa, en la que la demanda total de hidrógeno se satisface completamente mediante electrólisis del agua, el modelo de ACV debe ampliarse a varios 100 MW.

Sin embargo, para tener en cuenta las limitaciones tecnológicas, y contemplar un escalado razonable y considerar que el impacto ambiental depende de la fuente de electricidad, si lo escalamos considerando únicamente el uso de renovables el impacto de los electrolizadores sería considerablemente menor y las conclusiones de ACV podrían ser engañosas. Además, como no vamos a tener en cuenta la distribución, estaríamos no teniendo en cuenta un impacto que es crucial a la hora de desplegar el reparto de esas cantidades de hidrogeno. Por lo tanto, de cada tecnología elegiremos un tamaño de acuerdo con las capacidades actuales de cada una, y además eficiente en términos de producción.

Para el reformado un tamaño de 200 MW para una planta de SMR sería representativo de una instalación industrial media, capturando eficiencias comerciales, sin embargo, no se suele encontrar información acerca de la distribución de la energía para este tipo de plantas, así que se recurre a diseños académicos de baja escala de plantas de reformado para obtener los datos que al final se relacionan con la producción de hidrógeno. Un tamaño de 50 MW sería adecuado para una planta de electrólisis PEM, permitiendo una comparación realista, ya que representa instalaciones que están en expansión y capaces de entrar en el mercado de hidrógeno verde sin embargo actualmente los proyectos en España y Europa el tamaño máximo de estos sistemas suele ser 10 MW. Un tamaño de 100 MW para la tecnología de electrólisis alcalina reflejaría bien su nivel de madurez tecnológica y su capacidad comercial, lo que permitiría una comparación adecuada con los otros sistemas.

3.1 Reformado con vapor

Para realizar el inventario se parte del siguiente escenario:

- La planta se alimenta con 2,40 kg gas natural/s.
- El poder calorífico del gas natural es 14,69 kWh/kg y su densidad 0,737 kg/m³ (Martinez, 2024).
- Capacidad calorífica del metano 45,3 J/mol. Se asume que el calor para elevar la temperatura en el reformador será aportado por electricidad y gas residual del PSA en proporciones 1:1.
- La vida media de una planta de 200 MW de producción de hidrógeno SMR es de 25 años.
- La planta opera un total de 8000 horas al año.
- Rendimiento óptimo con solución de MEA al 20% con una densidad de 1016 kg/m³ (Sánchez, 2023).
- Suponemos pérdidas por evaporación del 5% v. v de agua en el pretratamiento con amina.
- Calor latente de vaporización del agua 2260 kJ/kg.
- El caudal de agua de refrigeración desde el pretratamiento hasta la purificación es de 1157 m³/h (Ferraces Azcunaga & López Gestoso, 2016) y se asumen pérdidas por evaporación del 2%, además se considera que no se realiza purga de agua ya que se usa agua suave en el sistema.

- En el reformado la razón vapor a metano óptima es $\geq 2,5$, seleccionamos 3:1 (H. G. Park et al., 2019), para el modelo en el simapro se va a reportar un consumo solo de 1:1.
- Que la vida del catalizador son 6 años (Fouad & Gaber, 2019); En total el catalizador se recarga 3 veces más la inicial.
- La carga de los reactores de WGS del alta y baja temperatura son 8600 kg de óxido de hierro y 9400 kg de catalizador de cobre y zinc, respectivamente. El catalizador basado en hierro del WGSR requiere reemplazo cada 5 años (Baraj et al., 2021).
- En el WGS se produce CO_2 en proporciones que no pueden ir directamente al sistema de purificación por lo que en este punto se instala una unidad de captura de CO_2 , que consume 40 kWh/ton CO_2 .
- El consumo de energía del PSA para obtener pureza del 99,94% es 5,19kWh/kg H_2 (Nordio et al., 2021).
- El compresor no requiere lubricantes y funciona a una potencia de 2250 kW (*CHS Reciprocating Compressor - Hyjack: Hydrogen Online*, n.d.), la presión de entrada para este compresor es de 1 bar y la salida 200 bar.

3.1.1 Suposiciones

- Se asume que la MEA permanece activa durante un periodo de dos años, lo que implica la necesidad de realizar 13 recargas de amina a lo largo de su vida útil. La capacidad de captura de CO_2 considerada es de 0,5 mol CO_2 /mol de amina (Sánchez, 2023).
- El CO_2 eliminado del gas natural se considera emitido directamente a la atmósfera.
- El gas natural empleado presenta un máximo de 2,5% de CO_2 y 15 mg/ m^3 de H_2S (*Calidad Del Gas - Sistema Gasista - Enagás*, n.d.) . Se asume que el gas natural está compuesto exclusivamente por metano y 2,5% de CO_2 , considerando las demás componentes como insignificantes.
- Para alcanzar la temperatura de 800°C requerida en el reformador, partiendo de los 120°C del vapor de entrada, se emplea electricidad y el gas residual del PSA.
- En la captura de CO_2 posterior al PSA, únicamente se considera el consumo energético, simplificando el análisis al proceso más intensivo en términos de energía.
- Se estima que el vapor recuperable del reformador es de 2 moles por cada 3 moles de vapor alimentado, de acuerdo con la estequiometría de la reacción de reformado.
- La conversión de metano en el reformador se asume del 90%.
- Se asume un ratio vapor/ CO en el reactor WGS de alta temperatura de 3:1, mientras que en el reactor de baja temperatura se considera un ratio de 2:1, en ambos casos superiores al mínimo de 1:1 (Baraj et al., 2021) .
- El proceso WGS no se considera intensivo en electricidad, dado que es un proceso químico exotérmico que utiliza vapor como insumo principal. Este vapor, que en entornos industriales típicamente proviene del reformador, se modela como obtenido de la tecnosfera por simplificación.
- Se supone que el catalizador basado en cobre tiene una vida útil de cinco años.
- Las capacidades de adsorción consideradas son: 2 mol CO_2 /kg para carbón activado, 2 mol CO /kg para zeolitas, y 5 mmol CH_4 /g para carbón activado.
- Dado que los gases residuales del PSA son significativos, se considera que se queman en una caldera para la producción de energía. Los poderes caloríficos inferiores utilizados son: CO (10,1 MJ/kg), CH_4 (50 MJ/kg), y el CO_2 emitido se aproxima a 0,724 kg por operación.
- Se supone que el 20% de la energía consumida en el PSA puede recuperarse en forma de calor.
- Se estima que un 20% de la electricidad consumida por el compresor puede recuperarse en forma de calor. Para el sistema de enfriamiento, se considera una pérdida del 0,1%/hora debido a evaporación y arrastre.

- El compresor cuenta con cuatro etapas, cada una equipada con un pistón y dos anillos de PTFE por pistón. Se asume un diámetro típico de pistón de 200 mm, adecuado para caudales de aproximadamente 2000 m³/h. Se considera necesario reemplazar los anillos de pistón cada 10.000 horas de operación.
- La recuperación de calor en todas las etapas del compresor se contabiliza, restándose al calor necesario para la producción de vapor en la industria química, lo que reduce la cantidad equivalente de energía requerida para producir 1 kg o 1 MJ de vapor empleado en varias etapas del modelo.
- Los diafragmas de los compresores se consideran residuos no reciclables, por lo que se supone su disposición en vertederos de residuos materiales, dado que los desechos de PTFE no suelen reciclarse.
- Se asume una vida útil de tres años para los tamices moleculares utilizados.
- Se considera la recuperación de níquel (Ni) contenido en 1 kg de catalizador, cuya composición es de 100 g de Ni (10% en peso), mientras que el 90% restante son otros metales y soportes, asumidos como inertes durante el proceso de lixiviación. La lixiviación del níquel se realiza con una eficiencia del 95%, utilizando HCl en exceso y alcanzando una concentración final de 3 M en la solución lixiviada. Se asume que únicamente el níquel reacciona con el HCl.
- El proceso de enriquecimiento de níquel se lleva a cabo mediante extracción por solventes, con una eficiencia de recuperación del 98%. Se considera un consumo de 0.1 kg de solvente orgánico por cada kg de catalizador procesado, sin reciclaje del solvente en este ejemplo simplificado. En la etapa de separación del ácido, se logra una eficiencia del 95%, con la suposición de que el ácido se recicla completamente para su reutilización en el proceso.
- En la etapa final de electroobtención (EW), se supone una eficiencia del 98% para el níquel recuperado. Además, se utiliza agua en el proceso, con un consumo de 1 kg de agua por cada kg de catalizador para las etapas de lavado y dilución, asumiendo que el 50% del agua empleada se recicla.

3.1.2 Limitaciones

- No se encuentran datos del consumo de los instrumentos de control por lo que no se incluye en el inventario.
- Por falta de información del proceso industrial de fabricación de catalizadores, se modela la fabricación de 1 kg de catalizadores de WGS a escala de laboratorio, considerando calcinación o calentamiento en horno de capacidad 1L y potencia nominal 1,8 kW (HeraScientific, 2024).
- En el proceso de WGS no se modela el tratamiento de los catalizadores una vez usados.
- El PTFE del mantenimiento del compresor se supone que se debe tratar como un residuo peligroso que emite en su incineración controlada, no se encontró dentro de la base de datos el HF para modelar un proceso similar por lo que se usa un proceso genérico de incineración de residuos peligrosos.
- Para el fin de vida del catalizador de níquel se tuvieron que hacer muchas suposiciones y cálculos que se enseñan en el anexo A.

3.1.3 Cálculos

La muestra el balance de materia con las conversiones supuestas.

Tabla 3-1. Balance de materia Reformado

	entrada kmol/s	WGS alta salida	WGS baja kmol/s	fraccion salida de WGS	peso despues de WGS kg/s	Despues de Captura kmol/s
CO	0,132	0,0132	0,003	0,004	0,074	2,63,E-03
H ₂	0,395	0,5133	0,524	0,782	1,048	5,24,E-01
CO ₂		0,1185	0,129	0,192	5,676	1,29,E-02
CH ₄			0,015	0,022	0,234	1,46,E-02

Hidrógeno producido: $2 \times 0,524 = 1,0477 \text{ kg/s}$

Hidrógeno producido durante la vida de la planta:

$$H_2 \frac{kg}{s} \times 3600 \text{ s} \times 8000 \text{ h} \times 25 \text{ años} = 7,54 * 10^8 \text{ kg } H_2$$

3.1.3.1 Inventario para la etapa de Pretratamiento

Gas natural

$$\frac{2,4 \text{ kg} \times 1 \text{ m}^3 \times 1 \text{ s}}{\text{s} \times 0,737 \text{ kg} \times 1,0477 \text{ kg } H_2} = 3,11 \frac{\text{m}^3}{\text{uf}} \quad (3-1)$$

MEA: Para una vida útil de 2 años, se requieren 13 cargas de la amina, se usa el porcentaje 20% p/v de amina y el volumen del reactor para estimar la cantidad de amina usada durante toda la vida de la planta (3-2)

$$\frac{0,2 \times 0,8503 \text{ m}^3 \times \frac{1000 \text{ L}}{\text{m}^3} \times 13}{\text{kg } H_2 \text{ producidos durante toda la vida}} \quad (3-2)$$

Energía (vapor): a partir del CO₂ en el gas natural (3-3) (ver más en Anexo A)

$$\frac{1,78 \text{ MJ} \times \text{kg} \times 0,057 \text{ kg } CO_2}{\text{kg } CO_2 \times 2,75 \text{ MJ} \times \text{kg } H_2} = 3,70 * 10^{-2} \text{ kg Vapor/uf} \quad (3-3)$$

Agua desionizada: Volumen de tanque de amina: 200L; Tipo de agua: desionizada.

$$\frac{200 \text{ L}}{7,54 * 10^8 \text{ kg } H_2} = 2,65 * 10^{-7} \text{ kg/uf} \quad (3-4)$$

Agua reposición: Se repone el 5% del volumen de agua cada hora

$$\frac{200 \text{ kg} \times 0,05 \times 8000 \text{ h} \times 25 \text{ años}}{7,54 * 10^8 \text{ kg } H_2} = 2,18 * 10^{-3} \text{ kg/uf} \quad (3-5)$$

Corriente ácida (CO₂): ver Anexo A.

3.1.3.2 Inventario para el Reformado

Vapor de agua a 120 °C y 15 bar

$$\frac{(2,40 - 0,060) \text{ kg } CH_4 \times 1 \text{ kmol} \times 3 \text{ kmol } H_2O \times 18 \text{ Kg } H_2O}{16 \text{ kg} \times 1,0477 \text{ kg}} = 2,52 \text{ kg/uf} \quad (3-6)$$

Catalizador Ni reformado

Carga de catalizador en el reformador: 4600 kg. 3 cargas de catalizador.

$$\frac{4600 \text{ kg} \times 3}{7,54 * 10^8 \text{ kg } H_2} = 1,79 * 10^{-3} \text{ kg cat/uf} \quad (3-7)$$

En la fabricación del catalizador de níquel se requieren las cantidades de la tabla por cada kilogramo de catalizar de NiO. Factor para convertir a unidad funcional:

$$\text{Cantidad/kg cat} \times 1,79 * 10^{-3} \text{ kg cat/uf} \quad (3-8)$$

Tabla 3-2. Recursos fabricación de catalizador de NiO (Agarski et al., 2017).

Proceso	Cantidad/kg cat	Cantidad /uf
Agua desionizada	444,12 kg	7,94x10 ⁻³
Oxido de aluminio	0,90 kg	1,61x10 ⁻⁵
Electricidad	625,84 kWh	1,12x10 ⁻²
Níquel	100 g	1,79x10 ⁻³
Ácido nítrico 60%	360 g	6,44x10 ⁻³

Recuperación de níquel

Los valores se ajustan a la unidad funcional multiplicándolos por (3-8)

Tabla 3-3. Modelado de proceso de recuperación de níquel.

Categoría	Parámetro	Valor
Entradas	HCl (37%)	0.503 kg (50% en exceso)
	Solvente orgánico	0.1 kg
	Agua	1 kg
Productos y Residuos	Níquel recuperado	0.0866 kg
	Residuos sólidos	1 kg (0.9 kg catalizador, 0.1 kg solvente)
	Agua residual	0.5 kg
	Ácido reciclado (HCl al 37%)	0.168 kg
Emisiones	CO ₂	0.422 kg
	NO _x	0.001 kg
	PM (partículas)	0.0005 kg

Calor para elevar temperatura

Dado que una gran parte es aportada por el PSA, con el balance del PSA y la quema de gases producidos entre la producción de hidrógeno en el PSA (3777 kg).

Tabla 3-4. Caudal másico gases residuales/uf del PSA.

	kg/s gases residuales PSA	MJ/s	kWh	kgCO2/s
CO	7,37,E-02	0,711	0,207	0,111
CO ₂	5,68,E-01			5,42,E-01
CH ₄	2,34,E-01	11,7	3,25	0,613
		12,44	3,457	
Total		9,95	12444 kWh	1,27 kg CO2/s

12444/3777 kg H₂ por hora = 3,30 kWh/uf. Se restan a la suposición de 4kWh/kgH₂.

$$4kWh/kgH_2 - 3,30 kWh/uf = 0,70 kWh/uf \quad (3-9)$$

CO₂ combustión

$$1,27/1,05kg H_2 = 0,70 kWh/uf \quad (3-10)$$

3.1.3.3 Inventario para el WGS

Vapor de agua

Es calculado del balance de materia. Vapor WGS alta: 3 x kmol CO. Vapor WGS baja: 2 x kmol CO.

Tabla 3-5. Balance de masa en el WGS

	entrada kmol/s	WGS alta salida	WGS baja kmol/s salida
CO	0,132	0,0132	0,003
H ₂	0,395	0,5133	0,524
CO ₂		0,1185	0,129
Vapor kmol/s		0,355	0,025
Vapor kg/s			6,87

$$\frac{kgVapor}{s} \times \frac{1s}{1,05 kg H_2} = 6,56 kg/uf \quad (3-11)$$

Catalizador de óxido de hierro

Tabla 3-6. Fabricación catalizador de óxido de hierro

Parámetro	Valor
Cantidad de catalizador en el reactor	8600 kg
Vida útil del catalizador	5 años
Composición del catalizador	85% Fe ₂ O ₃ , 15% Cr ₂ O ₃
Temperatura de calcinación	400 °C
Tiempo de calcinación	2 horas

$$\frac{8600 \text{ kg} \times 5 \text{ cargas de catalizador}}{7,54 * 10^8 \text{ kg } H_2} = 5,70 * 10^{-5} \text{ kgcat/uf} \quad (3-12)$$

$$1,8 \text{ kW} \times 2 \text{ horas} = 3,6 \text{ kWh/kg cat}$$

Tabla 3-7. Entradas catalizador de Hierro

Proceso	Cantidad/kg cat	Cantidad /uf
Óxido de Hierro	0,85 kg	$4,84 \times 10^{-5}$
Óxido de Cromo	0,15 kg	$8,55 \times 10^{-6}$
Energía calcinación	3,6 kWh	$2,05 \times 10^{-4}$

Al multiplicar cada cantidad por $5,70 * 10^{-5} \text{ kgcat/uf}$, se obtienen las cantidades de la Tabla 3-7.

Catalizador de cobre y zinc

Tabla 3-8. Modelo catalizador de Cobre y Zinc

Parámetro	Valor
Cantidad de catalizador en el reactor	9400 kg
Vida útil del catalizador	5 años
Composición del catalizador	31% Cu, 19% Zn, 50% Al
Temperatura de secado del catalizador	373 K
Tiempo de secado del catalizador	24 horas

A partir de la composición y los pesos atómicos se haya el peso y el porcentaje de cada elemento. Luego tomando como base la preparación de 1 kg de catalizador se obtienen las cantidades de óxidos para conseguir estos porcentajes.

A nivel industrial los catalizadores se preparan con óxidos por lo que se supone reemplazo de sales de nitrato por óxidos. La cantidad de NaOH por cálculo estequiométrico de la formación de hidróxidos de cada uno de los metales.

Cálculo de catalizador por unidad funcional

$$\frac{9400 \text{ kg} \times 5 \text{ cargas de catalizador}}{7,54 * 10^8 \text{ kg } H_2} = 6,23 * 10^{-5} \text{ kgcat/uf}$$

Tabla 3-9. Fabricación de catalizador de cobre y zinc (Li et al., 2017).

Proceso	Cantidad/kg cat	Cantidad /uf
Óxido de cobre	540,65 g	$3,37 \times 10^{-2}$
Óxido de Zinc	338,99 g	$2,11 \times 10^{-2}$
Óxido de Aluminio	1117,67 g	$6,96 \times 10^{-2}$
NaOH	2192,37 g	$1,37 \times 10^{-1}$
Electricidad	43,2 kWh	$2,69 \times 10^{-3}$

3.1.3.4 Inventario para la captura de CO₂

Energía limpieza y comprimido

40kWh/tonCO₂. Caudal de CO₂ capturado (del balance de materia): 0129*90%=0,116kmol/s.

$$\frac{40kWh \times 1ton \times 1kg \times 0,116kmol \times s}{1tonCO_2 \times 1000kgCO_2 \times 1kmol \times s \times 1,047kgH_2} = 4,43 * 10^3 kWh/uf \quad (3-13)$$

CO₂ al mercado

$$\frac{0,116kmol \times 44kgCO_2 \times s}{s \times 1kmol \times 1,047kg \times H_2} = 4,88kgCO_2/uf \quad (3-14)$$

3.1.3.5 Inventario para la purificación PSA

Zeolita y Carbon activo

Se supone recambio de tamices moleculares cada 3 años, por lo que durante toda la vida se harían 9 cargas de tamices moleculares y con las cantidades en PSA (Anexo a)

$$\frac{Cantidad\ tamiz\ molecular \times 9}{kg\ H_2\ roducidos\ durante\ toda\ la\ vida} \quad (3-15)$$

Energía

Se supone que el 20% de la energía consumida por el PSA (5,19kWh) = 1,04. Para el inventario se restan directamente de la energía consumida.

$$(5,19 - 1,04)kWh/kgH_2 = 4,15kWh/kgH_2 \quad (3-16)$$

Agua enfriamiento

Caudal de agua que circula: 1157 m³/h. Pérdidas por evaporación: 2%.

$$\frac{1157\ m^3 + 1157\ m^3 \times 0,02 \times 25 \times 8000\ h}{h \times 7,54 * 10^8 kg\ H_2} = 6,13 * 10^{-3}\ m^3/uf \quad (3-17)$$

3.1.3.6 Inventario compresión

Electricidad compresión

A partir del dato de potencia del compresor 2250 kW para Pentrada: 1 bar, P salida:200 bar Pentrada real: 20 bar, P salida real: 200 bar, se realiza un ajuste Para ajustar la potencia del compresor en función de un cambio en la presión de entrada (de 1 bar a 20 bar), aplicando la relación entre la potencia (Anexo A), la presión de entrada y la presión de salida en la compresión de gases se llega al dato de consumo de 916 kW de potencia.

Se disminuye el 20% del consume porque se supone que se recupera en forma de calor.

$$\left(\frac{916}{kgH_2}\right) - \left[\left(\frac{916}{kgH_2}\right) * 20\%\right] = 1,94 * 10^{-1} kWh/uf \quad (3-18)$$

Anillos PTFE

A partir de la densidad: $1,51 \text{ g/cm}^3$ y el volumen del anillo en (Anexo A): $1,51 \times 264 \text{ cm}^3 = 0,399 \text{ kg}$. Si los anillos tienen una vida de 10000h, se necesitan 20 cambios.

$$\frac{20 \times 0,399 \text{ cm}^3}{7,54 * 10^8 kg H_2} = 7,00 * 10^{-6} kg/uf \quad (3-19)$$

3.2 Electrólisis Alcalina

Para realizar el inventario se parte del siguiente escenario:

Tabla 3-10. Especificaciones stacks Alcalinos (Krishnan et al., 2024)

	Línea Base 2020	2030
Tamaño del Stack (MW)	2,2	20
No. de celdas	230	335
Superficie área activa (m ²)	2,1	2,6
Densidad corriente (W/cm ²)	0,5	2,3
Tiempo de vida años	8	8
Horas operativas carga total año (electricidad de la red)	161	161
Horas operativas a carga total (energía renovable)	4000	4000

- El sistema consume 100 MW.
- Se modelan stacks de 2MW (2000kW).
- El área de cada celda puede ser 2m^2 ($2 \times 10^4 \text{cm}^2$), cada celda produciría 10000 W (10kW) y se integrarían para formar stacks así:

$$\text{Stacks} = \frac{100MW}{2MW} = 50 \text{ stacks}$$

$$\text{Celdas por stack} = \frac{2000kW}{10kW} = 200 \text{ celdas/stack}$$

$$\text{Celdas totales} = 200 \times 50 = 10000 \text{ celdas}$$

- Para el tamaño de planta se selecciona un electrodo en el cátodo de una aleación de níquel molibdeno, de grosor entre 0,3 mm y densidad 500 g/m^3 (Karacan et al., 2022).
- Producción de todo el sistema 1900 kg/h (Electric Hydrogen, 2024).
- El diafragma corresponde al producto comercial Zirfon Perl (Agfa, 2020). consiste en una tela de polifenilsulfuro PPS que está recubierta simétricamente con una mezcla de polisulfona (PSU) y dióxido de zirconio (ZrO_2) en proporciones 80% ZrO_2 y 20% PSU (Henkensmeier et al., 2024).
- Como ánodo se utiliza níquel recocido, es decir se construye igual que el ánodo pero se recoce a 600°C durante 24 horas (Altinkaynak et al., n.d.).

- Se usan hojas de PTFE de 250 um alrededor del níquel y una hoja de 450 um alrededor del Zirfon. La densidad del PTFE es 2,2 g/cm³ (Karacan et al., 2022).
- Los platos bipolares son de acero al carbono con recubrimiento de níquel de 200 um (Krishnan et al., 2024).
- El sistema opera 4161 horas al año (Krishnan et al., 2024).
- El tiempo de vida del stack es de 8 años (Krishnan et al., 2024).
- El tiempo de vida del balance de planta es de 20 años (Minke et al., 2021).
- El electrolizador consume 15 L de agua cada hora (Electric Hydrogen, 2024), y concentración óptima de KOH al 30% p/p (Brauns & Turek, 2020).
- El hidrógeno abandona el electrolizador a una presión de 30 barg y pureza del 99,9% (Electric Hydrogen, 2024).
- Se asume cambios del electrolito cada 2 años. Tamaño del tanque de almacenamiento para el sistema de 200 m³, y densidad de la solución alcalina al 30% de 1290 kg/m³.
- El oxígeno no se tiene en cuenta en el inventario.
- El sistema de purificación tiene como objetivo eliminar principalmente vapor de agua, oxígeno y nitrógeno, para lo cual se usan tamices moleculares en un sistema, continuo al electrolizador con un consumo de energía de 0,5kWh/kg H₂ y una generación de gases residuales del 3,6% del caudal de alimentación (Ligen et al., 2020).
- Dado que los gases residuales obtenidos del sistema VPSA son N₂, O₂ y vapor de agua, se considera que no representan impacto ambiental y no se cuantifican en el inventario.
- El compresor de diafragma requiere cambios de diafragma y válvula cada 4000 h de operación. Tiene una vida de 20 años al igual que el electrolizador.
- De acuerdo con el fabricante de compresores, los componentes críticos en el mantenimiento del compresor son el diafragma y la válvula, los cuales deben ser reemplazados cada 4000 h de uso (Minnuo Compressors, 2022).

3.2.1 Suposiciones

- El balance de planta se va a resumir en cuatro (4) sistemas, sistema de suministro de energía, sistema de recirculación del electrolito, sistema de purificación de hidrógeno, sistema de monitoreo y seguridad. Las cantidades supuestas para un sistema de 100 MW se muestran en la Tabla 3-11.

Tabla 3-11 Inventario BoP electrolizador Alcalino de 100 MW.

Sistema BoP	Materiales	Partes	Cantidades kg/BoP
Sistema de Suministro de Energía	Cobre	Conductores	20000
	Acero estructural	Carcasa y soporte	40000
	Materiales plásticos		5000
Sistema de Recirculación de Electrolito	Acero inoxidable	Tanques y tuberías	2500
	Plásticos resistentes a alcalis	Tanques y bombas	1500
Sistema de Producción y Purificación de Hidrógeno	Acero inoxidable	Tanques y compresores	35000
	Aleaciones	Sistemas de alta presión	6000
	Material absorbente	Componentes del secado	4500
Seguridad y Monitoreo	Acero inoxidable	Sensores y válvulas	900
	Componentes electrónicos y plásticos	Sistema de control	800

- El caudal de 1900 kg/h de hidrógeno a 30 barg y 25°C equivale a 20635.24 Nm³/h. Una aproximación para cubrir este caudal sería usar 20 compresores, con lo que se necesitaría una potencia de 4000 kW aproximadamente (Minnuo Compressors, 2022).

Tabla 3-12. Especificaciones compresor

Modelo	Presión succión MPa	Presión Descarga	Capacidad Nm ³ /h	Potencia kW
MN-GD6-1000/20-180	2	18 Mpa	1000	185

- Se supone que para un compresor de 1000 Nm³/h de capacidad un valor de 5 válvulas DN 125 es plausible.
- Se asume que el diafragma de cada compresor pesa 2 kg como estimación plausible, y que al ser un compresor de 2 etapas se requieren 2 diafragmas por compresor.

3.2.2 Limitaciones

- No se ha tenido en cuenta la temperatura a la que ingresa el agua a los electrolizadores ya que se encuentra información de consumo de energía general para el electrolizador asumiéndose que esta ya ésta incluida.
- No se encuentra el acero al carbono en la base de datos, en su lugar se elige una baja aleación de acero para los platos bipolares.
- No hay estudios sobre la degradación de los lechos desecantes en la unidad VPSA de la purificación en electrolizadores alcalinos por lo que no se tiene en cuenta en el inventario por falta de datos.
- El agua de enfriamiento consumida en la compresión del gas depende de características del compresor, pero un estimado podría estar entre 1,2 a 3,6 m³ por cada kg de hidrógeno comprimido y se asumen pérdidas del 1% por arrastre o evaporación. No se consiguió información sobre la cantidad de agua consumida en fichas técnicas.
- Se ha tomado del mercado electricidad de alto voltaje importada de Alemania que era la única disponible en Simapro, por lo que seguramente se tenga mayores impactos de los reales ya que no se está modelando una planta aquí al lado que es lo ideal de este planteamiento.

3.2.3 Cálculos

3.2.3.1 Inventario fabricación de celdas e integración de stacks

La Tabla 3-13 resume los materiales y si esta corresponde a la celda o stack en el diseño del stack alcalino, en el Anexo A, están los cálculos detallados.

Tabla 3-13. Composición del stack Alcalino

Cátodo	Diafragma	Ánodo	Sellos	Platos bipolares	Plato final
0,3 g	0,04 g	0,3 g	3080 g	6280 g	628 kg
Aleación de Ni	ZrO ₂ 0,01 g PSU	Ni recocido	PTFE	Acero al carbono	Aluminio
Celda	Celda	Celda	Celda	Celda	Stack

Energía recocido: 565 kJ/kg para producir 1 kg del material (Altinkaynak et al., n.d.).

Cálculos unidad funcional: 3 Cambios de stack en toda la vida del electrolizador se utilizan 50*3 stacks. Así para obtener la cantidad de cada material por unidad funcional se multiplica por la respectiva ecuación (3-20), (3-21) o (3-22).

$$H_2 \text{ toda la vida} = 4161 \text{ h} \times 1900 \frac{\text{kg}}{\text{h}} \times 20 \text{ años} = 1,52 * 10^8 \text{ kg } H_2$$

$$\frac{150 \text{ stacks}}{1,52 * 10^8 \text{ kg } H_2} = 9,84 * 10^{-7} \frac{\text{stacks}}{\text{uf}} \quad (3-20)$$

$$\frac{\text{celda}}{\text{uf}} = 9,49 * 10^{-7} \frac{\text{stacks}}{\text{uf}} \times 200 \frac{\text{celdas}}{\text{stack}} = 1,97 * 10^{-4} \frac{\text{celdas}}{\text{uf}} \quad (3-21)$$

$$9,49 * 10^{-7} \frac{\text{stacks}}{\text{uf}} \times 628 = 5,95 * 10^{-4} \frac{\text{kg acero plato final}}{\text{uf}} \quad (3-22)$$

3.2.3.2 Inventario Ensamble del sistema con el balance de planta

$$\frac{BoP}{\text{uf}} = \frac{BoP}{20 \text{ años} \times 4161 \text{ h/año} \times 1900 \text{ kg/h}} = 6,56 * 10^{-9} BoP/\text{uf} \quad (3-23)$$

Se resumen los materiales descritos en la Tabla 3-11 Inventario BoP electrolizador Alcalino de 100 MW. Multiplicando cada cantidad por (3-23) se halla la cantidad de materiales por unidad funcional.

Tabla 3-14. Materiales BoP electrolizador Alcalino.

Materiales BoP	kg/BoP	Peso kg/uf
Cobre	20000	1,26x10 ⁻⁴
Acero inoxidable	40000	4,74x10 ⁻⁴
Plástico (PC)	5000	3,16x10 ⁻⁵
Plásticos resistentes a álcalis (Polipropileno)	1500	9,49x10 ⁻⁶
Aleación de acero	6000	3,79x10 ⁻⁵
Material absorbente	4500	2,85 x10 ⁻⁵
Componentes electrónicos	800	5,06x10 ⁻⁶

3.2.3.3 Inventario electrólisis

Tabla 3-15. Resumen de entradas Electrólisis (Uso)

Parámetro	Valor
Consumo de agua	15 L/kg H ₂
Producción de hidrógeno	1900 kg/hora
Consumo total de agua	28.500 L/h (28,5 m ³ /h)
Consumo de electricidad	100 MW/h
Distribución de energía	4000 h (renovable), 161 h (red)

Parámetro	Valor
Porcentaje de energía	96% (renovable), 4% (red)

Energía

Al multiplicar cada porcentaje de energía por (3-24).

$$\frac{MWh}{uf} = \frac{100 MWh}{1900 kg/h} = 5,26 * 10^{-2} MWh/uf \quad (3-24)$$

KOH

30% p/p, Cambio de KOH: cada 2 años, total cambios en toda la vida del electrolizador (20/2=10). (ver Anexo A)

$$\frac{KOH}{uf} = \frac{11610 \times 10}{1,58 * 10^8 kg H_2} = 7,34 * 10^{-4} kgKOH/uf \quad (3-25)$$

3.2.3.4 Inventario purificación

Tabla 3-16. Entradas y salidas para el proceso de purificación

Parámetro	Valor
Caudal de alimentación	1900 kg/h
Gases residuales	3,6% = 68,4 kg/h
Energía consumida	0,5 kWh/kg H ₂
Caudal de H ₂ a la salida del VPSA	1831,6 kg/h

Gases residuales VPSA

$$\frac{68,4 kg}{1900 kg/kg H_2} = 0,036 kg/uf \quad (3-26)$$

3.2.3.5 Inventario Compresión

Energía compresión

Energía compresión de 30 a 200 bar: 4000 kWh

Horas de trabajo anual: 4161

Años de vida del sistema: 20

$$4000 kWh \times \frac{4161 \times 20}{1,58 * 10^8 kg H_2} = 2,18 kWh/uf \quad (3-27)$$

Mantenimiento

Cambios: 4161 x 20/4000 = 21

Compresores usados: 20
 Masa de diafragma: 2 kg (2 unidades por compresor)
 No. de válvulas DN 125: 5

$$\frac{20 \times 21 \times \text{No. Piezas o peso}}{H_2 \text{ producido en toda la vida}} \quad (3-28)$$

3.3 Electrólisis PEM

Para este inventario se parte del siguiente escenario:

- Se tomará como modelo un sistema electrolizador de 10 MW y tamaños de stack de 1 MW, se resume el escenario en la Tabla 3-17 (María Villarreal Vives et al., 2023).

Tabla 3-17. Parámetros generales planta electrólisis 10 MW.

Sistema	Parámetros	Valores
Electrolizador 10 MW	Entrada de energía (kW)	10000
	Consumo de agua (kg/h)	1620
	Producción de H ₂ (kg/h)	181,3
	Presión de salida (bar)	30
	Tiempo vida planta (años)	30
	Horas de operación a carga completa (renovable) (h/año)	4000
Sistema de enfriamiento	Horas de operación a carga completa (red) (h/año)	85
	Flujo de agua (kg/h)	70800
	Temperatura de salida del agua (°C)	76
Stack de 1 MW	Calor extraído en el circuito de enfriamiento (kW)	2827
	Tiempo de vida (años)	11

- El caudal de 181,3 kg/h a 30 bar de presión corresponde a 2042 Nm³/h.
- Se supone que las pérdidas de agua en el sistema de enfriamiento serán del 0,001% del flujo de agua en kg/h, y no se considera la cantidad inicial de agua.
- El sistema operara a carga completa con energía renovable 4000 horas/año, y a carga completa con energía de la red durante 85 horas/año (Krishnan et al., 2024).
- Para formar el electrolizador se van a integrar 10 stacks de 1MW de potencia cada uno y se seguirán los parámetros de diseño de la Tabla 3-18 ((Badgett et al., 2023).

Tabla 3-18. Especificaciones de diseño para electrolizador PEM de 1 MW

Parámetro	Suposición
Área catalítica	0,0877 m ²
Celdas por stack	300
Densidad de corriente	3,8 W
Dimensiones de celda	29,6x29,6 cm

- Se asume un diseño cuadrado de celda. El modelo de fabricación asumido para cada componente del electrolizador se basará en los materiales de fabricación. No se considera la preparación de las tintas de catalizador.

Tabla 3-19. Resumen componentes de un stack en un electrolizador tipo PEM

Componente	Material	Valor	Unidades
Catalizador Cátodo	Platino (Pt)	1	mg/cm ²
Ionómero	PFSA (Nafión 117)		
catalizador Ánodo	IrO ₂	2	mg/cm ²
Plato bipolar de titanio	Titanio recubierto con platino u oro.		
Platos de presión	Aluminio		
Empaques	PPS		
PTL	Titanio poroso sinterizado	250	um

- El proceso de Roll to roll para fabricar la CCM se modela con un equipo de recubrimiento de doble cara que opera con un ancho máximo de recubrimiento de 250 mm a velocidad de recubrimiento de 750 mm/min y consume máximo 3KW (*Mendel Chemicals SRL*, n.d.). ya que el ancho de recubrimiento alcanzado es de 25 cm es cercano al de la celda modelada.
- El nafion 117 se comercializa en láminas de 180 um y densidad 2,0 g/cm² aproximadamente.
- El hidrógeno producido en toda la vida será:

$$30 \text{ años} \times 4085 \text{ h} \times 181,3 \frac{\text{kg}}{\text{h}} = 2,22 * 10^7 \text{ kg } H_2$$

- Las capas de transporte porosas de titanio (PTL) disponibles en el mercado comercial (*Caplinq*, n.d.), están compuestas por láminas de titanio en polvo sinterizado con un espesor de 250 μm, una porosidad del 0,35 y un tamaño de poro mediano de aproximadamente 3 μm (*Doan et al.*, 2021). En el caso de la capa de transporte porosa anódica, comúnmente se le aplica un recubrimiento de platino (generalmente de al menos 1 mg/cm² o 0,5 g/kW) con el propósito de minimizar la oxidación del titanio (*IRENA*, 2020).
- El sinterizado de titanio requiere temperaturas entre 1200 a 1500 °C, para lo cual se asume un consumo energético medio de 5kWh/kg de material (*Arnhold*, n.d.)
- El PTL del ánodo se recubre con una capa de 100 nm de oro (*Krishnan et al.*, 2024) para evitar pasivación.
- Como PTL del cátodo se usa papel de carbono utilizado en las celdas de combustible PEM ya que el grafito es mucho más estable que la mayoría de los metales en presencia de hidrógeno (*Bareiβ, de la Rua, Möckl, & Hamacher*, 2019).
- No se considera el proceso de electrodeposición de oro sobre el PTL al no considerarse intensivo en energía.
- Como material para los BPPs metálicos se selecciona acero inoxidable 304, este normalmente se recubre con un material protector contra la corrosión mediante deposición física de vapor (PVD) (*Tang et al.*, 2021). Se asumen los datos de referencia de 4,61x10⁻⁴ kg/uf de acero inoxidable y recubrimiento con capa de oro de 100 nm que pesa 4,45x10⁷ kg/uf.
- Los sellos se modelan como un sello tipo marco que coincide con el área periférica de 29,6x29,6 de dimensiones internas y 30,6x30,6 de dimensiones externas y 0,90 mm de grosor (*Moreno Soriano et al.*, 2021).

- Los platos finales son de acero inoxidable el material de los platos una aleación de aluminio de 35 mm de grosor (Zhang et al., 2022). El área del plato es 1225 cm² (Badgett et al., 2023) y densidad de 2,7 g/cm³.
- De acuerdo con (Barei, de la Rua, Mckl, & Hamacher, 2019), un sistema tipo PEM de 1MW consta de un contenedor, una bomba para asegurar el suministro de agua, componentes electrnicos, materiales de construccin como aceto, plstico y acero inoxidable para tuberas, una aproximacin de materiales para un sistema que produce 1MW (Barei, de la Rua, Mckl, & Hamacher, 2019).
- Para el balance de planta se usa un escalado sublineal con un factor de escala n = 0,7 el cual es usado en proyectos de ingeniera a gran escala incluyendo electrolizadores.

$$Mescalado = Mbase \times \left(\frac{10}{1}\right)^{0,7}$$

- El tiempo de vida del balance de planta corresponde al del electrolizador.
- Para el comprimir el caudal de hidrgeno de 2042 Nm³/h se puede usar dos compresores con las especificaciones de la Tabla 3-20. Utilizamos una potencia consumida a 370 kW.
-

Tabla 3-20. Especificaciones compresor

Modelo	Presin succin MPa	Presin Descarga	Capacidad Nm ³ /h	Potencia kW
MN-GD6-1000/20-180	2	18 Mpa	1000	185

3.3.1 Suposiciones

- Para el sistema de enfriamiento del electrolizador, se asumen perdidas del 1% del caudal horario de agua circulante.
- Para el enfriamiento se supone que se requieren de 1,2 a 3,6 m³ de agua para el sistema de enfriamiento, y que se consume sin recuperar alrededor del 1% de este por prdidas de arrastre de vapor, es decir entre 0,02 m³ por kilogramo de hidrgeno comprimido.
- El electrolizador al ser ms compacto es ms sensible por lo que requiere lubricacin especializada y frecuente, por lo que se incluye en el balance del BoP.
- Vamos a suponer que el calor recuperado del electrolizador suple la energa necesaria aportada por la red por unidad funcional, por lo que en el inventario no tendremos en cuenta la energa de red.
- Se asume que el diafragma de cada compresor pesa 2 kg como estimacin plausible, y que al ser un compresor de 2 etapas se requieren 2 diafragmas por compresor.

3.3.2 Limitaciones

- El fabricante propone que se puede recuperar energa en forma de calor de manera que el electrolizador, sin embargo, no ha sido tenido en cuenta en el inventario (*Electrolizador PEM ME450: Productos Quest One*, n.d.).
- El nafion no se encuentra modelado en la base de datos ecoinvent, por lo que se selecciona un termoplstico cuyo proceso de fabricacin es similar como el PTFE que tambin es un polmero de base fluorada.
- No se consigui informacin sobre la cantidad de agua consumida en fichas tcnicas. Por lo que se asumi un valor considerado como pausable.

- Se ha utilizado un diafragma de polibutadieno acrilonitrilo (NBR) en lugar de PTFE para el mantenimiento del compresor, ya que no hay datos específicos para la producción de diafragmas de PTFE en la base de datos ecoinvent 3.10. El NBR fue seleccionado como el material disponible en ecoinvent con propiedades más similares en términos de resistencia a aceites y combustibles. Sin embargo, su resistencia térmica y química es menor.
- Esto introduce cierta incertidumbre en los resultados. En particular, la vida útil del diafragma de NBR podría ser menor que la del PTFE en las condiciones de operación del compresor, lo que significa que se reemplazaría el diafragma más a menudo. Esto a su vez aumentaría los impactos ambientales asociados con la fabricación, transporte y gestión de los residuos del diafragma a lo largo del ciclo de vida del compresor.
- No se encontró el iridio en la base de datos por lo que se tomó como aproximación el rodio ya que es igualmente raro como el iridio, y propiedades químicas similares así como ser electrocatalizadores eficientes.
- Se ha seleccionado el flujo de *Polipropileno granulado, mercado global (GLO)* como un sustituto del Nafion en el contexto de la celda PEM debido a la falta de datos específicos sobre Nafion en la base de datos. el polipropileno carece de las propiedades específicas requeridas para el funcionamiento eficiente de la celda PEM. Se reconoce que esta sustitución puede no capturar completamente los efectos ambientales asociados con el Nafion. Como alternativa, se ha optado por el polietileno de alta densidad (HDPE). A pesar de que el HDPE no posee la misma resistencia térmica que el PPS.
- No se ha tenido en cuenta en los cálculos el calor extraído del sistema de enfriamiento, el cual podría significar un ahorro considerable de energía.

3.3.3 Cálculos

3.3.3.1 Inventario Fabricación de celdas

Durante toda la vida de le electrolizador se realizan 3 cambios de stacks. Dando un total de 9000 celdas en toda la vida (300 celdas*10 stacks*3 cambios). Para calcular la cantidad de material de celda por unidad funcional se multiplica este por la ecuación (3-29).

$$\frac{9000}{2,22 * 10^7 \text{ kg } H_2} = \text{celda/uf} \quad (3-29)$$

Tabla 3-21. Materiales Celda PEM

Parámetro	Cantidad/celda	Cantidad/uf
Platino	877 mg	$3,55 \times 10^{-1}$
IrO ₂	1754 mg	$7,10 \times 10^{-1}$
Nafion 117	31,6 g	$1,28 \times 10^{-2}$
Energía recubrimiento celda	$2,34 \times 10^{-2}$ kwh	$9,48 \times 10^{-6}$
Polvo de titanio	138,44 g	$5,61 \times 10^{-2}$
Energía sinterizado	0,3461 kWh	$1,40 \times 10^{-4}$
Sellos	14,086 g	$2,85 \times 10^{-3}$

*ver más detalles en Anexo A.

3.3.3.2 Inventario integración de stacks

El stack se completa con el conjunto de celdas y dos platos finales.

Tabla 3-22. Especificaciones plato final para integrar stacks

Parámetro	Valor
Material del ánodo	Aluminio A356
Grosor	35 mm
Área del plato	1225 cm ²
Densidad	2,7 g/cm ³
Volumen del plato	1225 cm ² ×3,5 cm=4287,5 cm ³
Masa del plato	2,7 g/cm ³ ×4287,5 cm ³ =11,57 kg
Masa del stack	11,57 kg×2=23,14 kg

Total stacks en toda la vida: 10 stacks x 3 cambios= 30 stacks.

$$\frac{23,14 \text{ kg} \times 30}{2,22 * 10^7 \text{ kg } H_2} = \text{kg plato final/uf} \quad (3-30)$$

3.3.3.3 Inventario BoP

Los valores en unidad funcional se obtienen al dividir la masa por el total de hidrógeno (2,22 * 10⁷ kg H₂) producido en toda la vida.

Tabla 3-23. Materiales principales asumidos para BOP.

Materiales	Masa (t) 1MW	Masa (t)10 MW	Kg/uf
Aleación acero baja	4,8	24,1	1,08x10 ⁻⁶
Aleación acero alto	1,9	9,5	4,29x10 ⁻⁷
Aluminio	0,1	0,5	2,26x10 ⁻⁷
Cobre	0,1	0,5	2,26x10 ⁻⁷
Plástico	0,3	1,5	6,77x10 ⁻⁸
Material electrónico	1,1	5,5	2,48x10 ⁻⁷
Lubricantes	0,2	1,0	4,51x10 ⁻⁸

3.3.3.4 Inventario electrólisis

La Tabla 3-24 Tabla 3-24. Entradas proceso de electrólisis PEM resume los aspectos relacionados a la electrólisis o uso del electrolizador.

Tabla 3-24. Entradas proceso de electrólisis PEM

Sistema	Parámetros	Valores
Electrolizador 10 MW	Entrada de energía (kW)	10000
	Consumo de agua (kg/h)	1620
	Producción de H ₂ (kg/h)	181,3
	Horas de operación a carga completa (renovable) (h/año)	4000
	Horas de operación a carga completa (red) (h/año)	85
Sistema de enfriamiento	Flujo de agua (kg/h)	70800
	Calor extraído en el circuito de enfriamiento (kW)	2827
Stack de 1 MW	Tiempo de vida (años)	11

Energía eléctrica

Al multiplicar cada porcentaje de energía por (3-34), se obtiene la energía por unidad funcional.

$$\frac{MWh}{uf} = \frac{10000 kWh}{181,3 kgH_2/h} = 5,52 * 10^1 MWh/uf \quad (3-31)$$

Agua enfriamiento

$$\frac{70800 kg Agua/h \times 1\%}{181,3 kg H_2/h} = 3,91 kg Agua/uf \quad (3-32)$$

Agua desionizada (electrólisis)

$$\frac{1620kg Agua/h}{181,3 kg H_2/h} = 8,94 kg Agua/uf \quad (3-33)$$

3.3.3.5 Inventario Compresión

Energía de compresión

Energía compresión de 30 a 200 bar: 370 kWh

Horas de trabajo anual: 4085

Años de vida del sistema: 30

$$380 kWh \times \frac{4085 \times 30}{2,22 * 10^7 kg H_2} = 2,04 kWh/uf \quad (3-34)$$

Diafragma y válvula

Cambios: 4085 x 30/4000 = 31

Compresores usados: 2

Masa de diafragma: 2 kg

Masa de válvulas: 3 kg

$$\frac{31 \times 2 \times Masa de 1 pieza}{H_2 producido en toda la vida} \quad (3-35)$$

4 EVALUACIÓN DEL IMPACTO

Este estudio pretende comparar el impacto ambiental de tres métodos de producción de hidrógeno: electrólisis mediante membrana de electrolito polimérico (PEM), electrólisis con electrolito alcalino y reformado con vapor. Se evaluarán categorías de impacto clave, como el consumo de agua y el agotamiento de recursos, utilizando datos actualizados para los sistemas más competitivos (Delpierre et al., 2021). El sistema incluye las etapas de conversión, purificación y acondicionamiento, excluyendo la construcción y el fin de vida.

La evaluación del impacto ambiental EICV incluye la recopilación de los resultados de indicadores para las diferentes categorías de impacto, que en conjunto representan el perfil de la evaluación del producto, en este caso 1 kg de H₂ en puerta de planta, a 200 bar y 25°C, con una pureza del 99,97% (ISO 14687, 2019).

Se sabe que el reformado (SMR) sigue siendo el método más utilizado para la producción de hidrógeno debido a su bajo costo en comparación con la electrólisis. Sin embargo, se reconoce que es necesario un avance tecnológico significativo para que el precio de la electrólisis se normalice y los electrolizadores puedan ser competitivos, tanto en términos de precio como en mejoras de impacto ambiental. El objetivo ideal es que los electrolizadores superen al SMR en todos los aspectos de impacto ambiental, no solo en términos de menores emisiones de CO₂, sino también en una mejora general de sostenibilidad.

4.1 Selección de categorías de impacto

El calentamiento global, por razones evidentes, junto con la toxicidad humana y la toxicidad a los ecosistemas, son categorías que habitualmente se analizan en los estudios de ACV sobre la producción de hidrógeno (Krishnan et al., 2024).

Adicionalmente, se ha incluido la categoría de radiación ionizante para evaluar el impacto asociado al mix energético en el uso de los electrolizadores. Aunque esta categoría no suele reportarse en la mayoría de los estudios debido a su aparente falta de relación directa con el tema, una inspección preliminar de los resultados reveló un impacto significativo. Por ello, se considera importante incluirla en el análisis.

Asimismo, se seleccionaron otras dos categorías de impacto clave que reflejan desafíos específicos de las tecnologías analizadas:

Escasez de Recursos Minerales: Los electrolizadores enfrentan desafíos importantes debido al uso de metales del grupo del platino (PGM), lo que implica un trabajo por hacer para reducir su dependencia en estos materiales.

Consumo de Agua: Existe la sospecha de que los electrolizadores podrían llegar a ser más intensivos en el uso de agua en comparación con el reformado, lo que representa un área clave de optimización.

4.2 Metodología de evaluación del impacto

Para llevar a cabo la evaluación de las categorías de impacto seleccionadas, se utilizó el método **ReCiPe H** en el nivel de punto medio, implementado a través del software SimaPro. Este método permite asignar automáticamente los resultados de los flujos de entrada y salida a las diferentes categorías de impacto, facilitando un análisis estructurado y conforme a los criterios de la norma **ISO 14044**.

La evaluación considera las categorías de impacto previamente justificadas, complementadas con un análisis detallado que asegura la pertinencia de las mismas bajo estándares internacionales. En la Tabla 4-1 se presenta un resumen de las categorías de impacto evaluadas, incluyendo una descripción de cómo se agregan los resultados, posibles casos de doble contabilización, y la pertinencia ambiental de cada categoría. Estos criterios, definidos en el contexto de la norma ISO 14044, fueron seleccionados como relevantes para garantizar un análisis sólido y transparente.

Tabla 4-1. Evaluación de las Categorías de Impacto

Categoría de Impacto	Suma de Impactos	Doble Contabilización	Pertinencia Ambiental
Global Warming	Los impactos se suman en términos de kg CO ₂ equivalente, considerando emisiones de gases de efecto invernadero (CO ₂ , CH ₄ , N ₂ O).	No hay doble contabilización directa, ya que esta categoría es exclusiva de los gases de efecto invernadero.	Altamente pertinente debido a la relevancia global de la crisis climática.
Ionizing Radiation	Evalúa el impacto acumulativo de fuentes de radiación en términos de kBq Co-60 equivalente.	Puede haber solapamiento con categorías de salud humana, como Human Carcinogenic Toxicity.	Pertinente para sistemas con exposición a radiación, como generación nuclear o manejo de residuos radiactivos.
Terrestrial Ecotoxicity	Agrega efectos tóxicos en ecosistemas terrestres por emisiones de metales pesados y pesticidas, expresados en CTUe (Comparative Toxic Unit).	Posible solapamiento con otras toxicidades (acuática, humana), dependiendo de los flujos evaluados.	Pertinente para proteger la biodiversidad y la salud de los ecosistemas terrestres.
Human Carcinogenic Toxicity	Mide el impacto acumulado de sustancias cancerígenas en términos de CTUh (Comparative Toxic Unit for Humans).	Puede superponerse con Ionizing Radiation en aspectos relacionados con la salud humana.	Altamente pertinente para la salud humana debido a su impacto directo en la calidad de vida y riesgos de salud.
Mineral Resource Scarcity	Calcula la contribución de la extracción de recursos minerales en términos de kg Cu equivalente, agregando múltiples flujos de extracción.	No hay doble contabilización directa con otras categorías.	Pertinente debido al agotamiento de recursos no renovables y su impacto económico y ambiental.

Categoría de Impacto	Suma de Impactos	Doble Contabilización	Pertinencia Ambiental
Water Consumption	Evalúa el uso neto de agua en términos de m ³ o m ³ eq AWARE, considerando extracción y reposición.	Puede haber solapamiento con eutrofización.	Altamente pertinente, especialmente en áreas con estrés hídrico o competencia por recursos hídricos.

4.3 Resultados de caracterización en SimaPro

La Tabla 4-2 resume el impacto total para cada categoría de impacto seleccionado, Por otra parte, la Tabla 4-3 muestra los impactos de cada categoría de impacto de forma independiente y por etapas. No se hace ninguna suposición sobre la importancia relativa de cada categoría.

Tabla 4-2. Resultados totales de la comparativa

Categoría de impacto	Unidad	H2 ALK	H2 PEM	H2 SMR
Global warming	kg CO ₂ eq	9,51,E-01	9,25,E-01	5,97,E+00
Ionizing radiation	kBq Co-60 eq	1,06,E+00	6,74,E-01	1,19,E+00
Terrestrial ecotoxicity	kg 1,4-DCB	4,46,E+00	7,85,E-01	6,20,E+00
Human carcinogenic toxicity	kg 1,4-DCB	1,02,E-01	2,42,E-02	4,15,E-02
Mineral resource scarcity	kg Cu eq	2,43,E-03	1,05,E-02	1,26,E-03
Water consumption	m ³	4,93,E-02	4,04,E-02	3,83,E-02

Tabla 4-3. Resultados desglosados por etapa

Categorías De Impacto	Caso	Unidad	Conversión	Purificación	Compresión
Global warming	SMR	kg CO ₂ eq	4,50,E+00	1,45,E+00	2,03,E-02
Ionizing radiation	SMR	kBq Co-60 eq	2,26,E-01	9,23,E-01	4,42,E-02
Terrestrial ecotoxicity	SMR	kg 1,4-DCB	5,19,E+00	1,06,E+00	-4,92,E-02
Human carcinogenic toxicity	SMR	kg 1,4-DCB	2,45,E-02	1,60,E-02	9,76,E-04
Mineral resource scarcity	SMR	kg Cu eq	3,83,E-04	8,30,E-04	4,69,E-05
Water consumption	SMR	m ³	4,93,E-03	1,78,E-02	1,56,E-02
Global warming	ALK	kg CO ₂ eq	4,33,E-01	9,58,E-02	4,21,E-01
Ionizing radiation	ALK	kBq Co-60 eq	4,64,E-01	1,11,E-01	4,86,E-01
Terrestrial ecotoxicity	ALK	kg 1,4-DCB	3,77,E+00	1,27,E-01	5,67,E-01
Human carcinogenic toxicity	ALK	kg 1,4-DCB	9,07,E-02	1,91,E-03	8,98,E-03
Mineral resource scarcity	ALK	kg Cu eq	1,88,E-03	9,98,E-05	4,48,E-04
Water consumption	ALK	m ³	2,18,E-02	1,40,E-03	2,61,E-02

Categorías De Impacto	Caso	Unidad	Conversión	Purificación	Compresión
Global warming	PEM	kg CO2 eq	3,94,E-01	0,00,E+00	5,31,E-01
Ionizing radiation	PEM	kBq Co-60 eq	2,45,E-01	0,00,E+00	4,29,E-01
Terrestrial ecotoxicity	PEM	kg 1,4-DCB	3,74,E-01	0,00,E+00	4,11,E-01
Human carcinogenic toxicity	PEM	kg 1,4-DCB	1,62,E-02	0,00,E+00	8,01,E-03
Mineral resource scarcity	PEM	kg Cu eq	1,01,E-02	0,00,E+00	3,99,E-04
Water consumption	PEM	m3	1,57,E-02	0,00,E+00	2,46,E-02

5 INTERPRETACIÓN DEL ACV

La interpretación del estudio del Análisis de Ciclo de Vida (ACV) comprende tres aspectos principales: identificación de asuntos significativos, evaluación de la integridad y coherencia del análisis y finalmente conclusiones derivadas de la interpretación. Los resultados se interpretan en función de los objetivos y alcance definidos y deberían incluir un estudio de sensibilidad de entradas y salidas con el fin de estimar la incertidumbre de resultados para poder emitir algún juicio. Este trabajo académico ha sido construido simulando los procesos con información de referencia, así que puede tomarse como una guía para estudios más detallados, por lo que se estarán relacionando la evaluación de calidad de los datos para aspectos significativos.

5.1 Análisis de los asuntos significativos

5.1.1 Análisis por categorías de impacto

La Figura 5-1 muestra que las categorías de impacto más significativas son calentamiento global y ecotoxicidad terrestre y radiación ionizante, lo cual se evidencia también en el gráfico de radar (Figura 5-2) que muestra que los impactos de las tres tecnologías de producción de hidrógeno se distribuyen ampliamente en estas tres categorías.

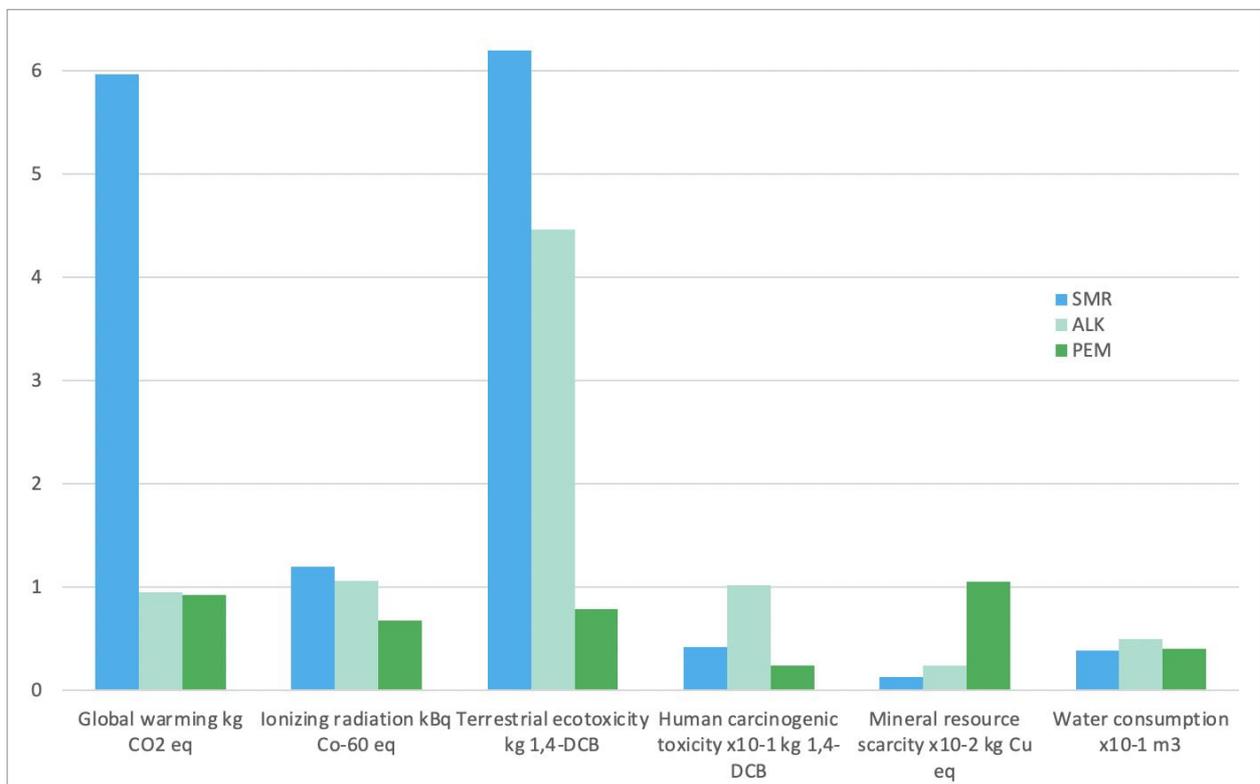


Figura 5-1. Contribución a categorías de impacto de cada tecnología

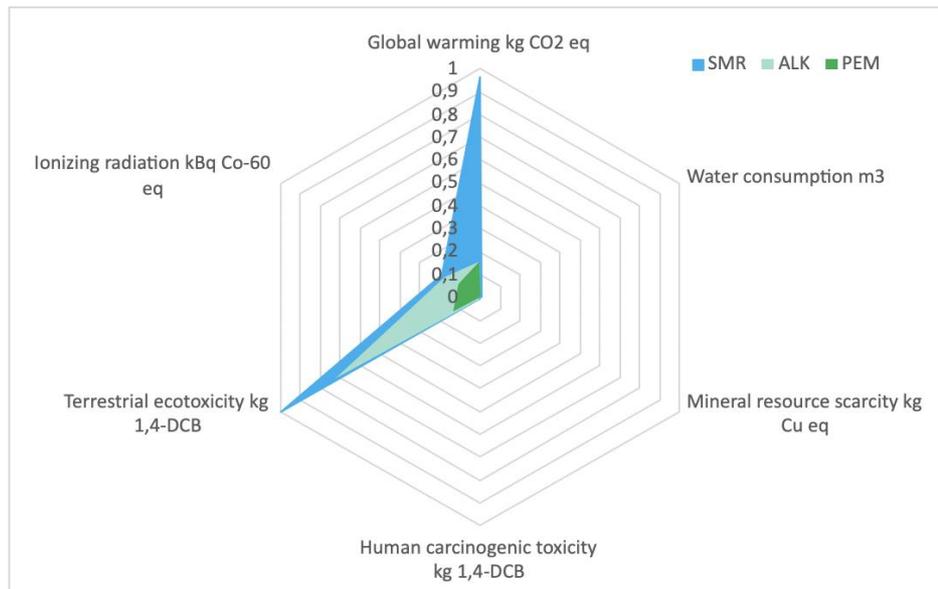


Figura 5-2. Gráfica de radar de valores normalizados por tecnología

SMR (Reformado de metano con vapor)

- El impacto en el calentamiento global (GW) proviene principalmente de la producción de gas natural utilizado en el proceso.
- La ecotoxicidad terrestre se debe al uso de vapor en el reformado, cuyo impacto está asociado a la producción y mercado de carbón.
- El impacto en la radiación ionizante está relacionado con el consumo de electricidad en el proceso de purificación. En el mercado energético español, donde una proporción significativa proviene de energía nuclear, este impacto se atribuye al tratamiento de los residuos generados en el relave de minería de uranio.

ALK (Electrólisis Alcalina)

- El impacto en el calentamiento global (GW) se origina en la proporción de gas natural que alimenta el mix energético de España.
- La ecotoxicidad terrestre proviene del proceso de refinamiento del hierro para producir el acero utilizado en las celdas, un proceso intensivo en el consumo de coque.
- El impacto en la radiación ionizante está asociado nuevamente al mix energético español, con un porcentaje significativo de energía nuclear. Este impacto se relaciona con los residuos generados durante el tratamiento de relave de uranio.

PEM (Electrólisis de membrana de intercambio de protones)

- El impacto en GW se debe a los consumos de electricidad, y está a la producción de electricidad de alto voltaje y esta a su vez al gas natural usado en su producción en plantas de energía de ciclo combinado.
- La ecotoxicidad terrestre proviene también del consumo de electricidad, que incluye la energía de media y alta tensión, con una proporción significativa generada por oil (petróleo).
- El impacto en la radiación ionizante se debe al uso de electricidad en el mercado español, donde una parte considerable del mix energético proviene de energía nuclear. Esto genera un impacto asociado al tratamiento de los residuos en el relave de minería de uranio.

5.2 Evaluación de resultados por etapas de producción o uso

La Figura 5-3 muestra el aporte al impacto de cada etapa de producción, a la categoría, y también permite ver cuál de las tecnologías tiene mayor impacto en cada categoría. Se ha manejado la misma escala de colores que en el inventario y el esquema que define el alcance del sistema (Figura 2 2); azul: conversión, naranja: purificación, violeta: compresión. Las Figura 5-4, Figura 5-5 y Figura 5-6, la distribución de impactos en las categorías para cada tecnología de producción de hidrógeno, respectivamente.

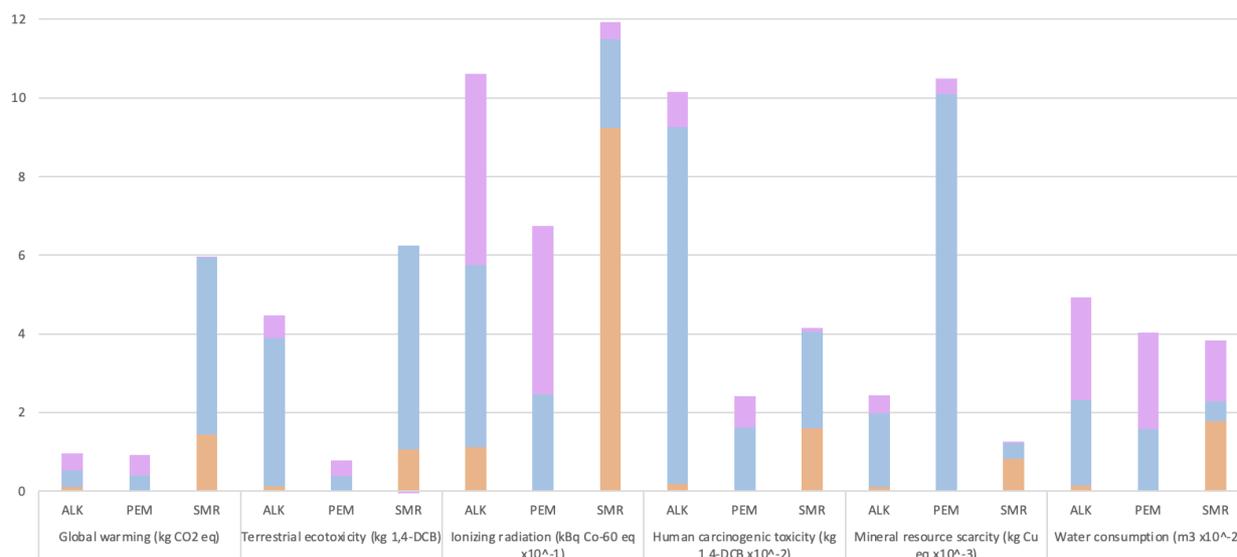


Figura 5-3. Impactos distribuidos por etapas de conversión, purificación y compresión

5.2.1 Calentamiento Global GW

- El impacto del SMR es aproximadamente seis veces mayor que el de ALK o PEM. Solo la etapa de purificación en SMR supera el impacto total de todas las etapas combinadas en ALK o PEM.
- Este impacto proviene principalmente del consumo energético para la purificación: 5,19 kWh/kg H₂ a la salida del PSA.
- En las etapas de electrólisis y purificación, los impactos de ALK y PEM son muy similares.

5.2.2 Ecotoxicidad Terrestre

- Los impactos en la etapa de conversión son comparables entre ALK y SMR. En el caso de SMR, esto se debe al uso de vapor en el proceso de reformado. Para ALK, el impacto proviene de la producción de acero para el Balance of Plant (BoP).
- Una posible mejora para ALK sería implementar procesos de recuperación de acero o reducir su uso. En comparación, el BoP de PEM utiliza menos acero, ya que las celdas son más compactas.

5.2.3 Radiación ionizante

- El impacto en SMR se origina principalmente en la etapa de purificación debido al alto consumo energético (5,19 kWh/kg H₂). Sin embargo, este dato tiene baja calidad, ya que

la información disponible corresponde a un proceso diferente orientado a la separación de H₂, no a su purificación. Es posible que este valor esté sobreestimado.

- Además, debería ser menor o comparable al impacto de ALK, ya que el diseño del proceso incluye una unidad de captura de CO₂ antes del PSA, reduciendo significativamente el flujo y el consumo energético en esta etapa. Ignorando este dato anómalo, se observa que ALK tiene un mayor impacto en radiación ionizante porque PEM no requiere la etapa de purificación.
- Respecto a la compresión, la calidad de los datos es insuficiente para realizar juicios concluyentes. En términos de electrólisis, el consumo energético de ALK es de 0,0525 MWh/uf, mientras que en PEM es de 0,054 MWh/uf.

5.2.4 Toxicidad humana carcinogénica

- ALK tiene un impacto cinco veces mayor que PEM y 2,5 veces mayor que SMR. Esto se debe principalmente a la etapa de conversión, en particular al acero utilizado en las celdas y el BoP, cuyo impacto está relacionado con los siguientes procesos:

Horno de arco eléctrico (Electric Arc Furnace, EAF): Este proceso es responsable de la mayor parte de las emisiones asociadas a la producción de acero debido a su alto consumo de energía eléctrica y al uso de materiales reciclados o ferroaleaciones. Aunque es más eficiente que los altos hornos tradicionales, sigue siendo intensivo en energía.

Producción de ferromanganeso: El ferromanganeso, una ferroaleación utilizada para mejorar las propiedades mecánicas del acero, genera impactos significativos en categorías como calentamiento global y toxicidad humana. Su producción requiere la reducción de minerales de manganeso en hornos eléctricos, lo que consume grandes cantidades de energía y libera emisiones de CO₂ y otros contaminantes atmosféricos.

5.2.5 Escasez de recursos minerales

- El impacto en la etapa de conversión (electrólisis) es aproximadamente cinco veces mayor en ALK y diez veces mayor en PEM, en comparación con SMR. Esto se debe al uso de rodio, que se incluyó en el inventario como sustituto del dióxido de iridio por sus propiedades similares. Ambos pertenecen al grupo de metales del platino, y su impacto proviene de los procesos de minería de PGM (Platinum Group Metals).

5.2.6 Consumo de agua

- Los impactos en la etapa de compresión son similares entre las tecnologías, aunque los datos son de baja calidad.
- En la etapa de conversión, el consumo de agua en los electrolizadores es comparable: 0,02 m³/kg H₂, siendo ligeramente inferior en PEM y superior en ALK.
- PEM se beneficia al no requerir la etapa de purificación, evitando el agua necesaria para los sistemas de enfriamiento que sí son necesarios en ALK y SMR.
- Aunque el consumo total de agua en el método tradicional de SMR es comparable al de PEM, en este estudio no se encontró información desagregada por etapas para SMR. Esto implica que el agua reportada como de "purificación" incluye tanto la conversión como la purificación. Al final, los múltiples procesos del reformado terminan consumiendo una cantidad de agua similar a la de un electrolizador PEM.

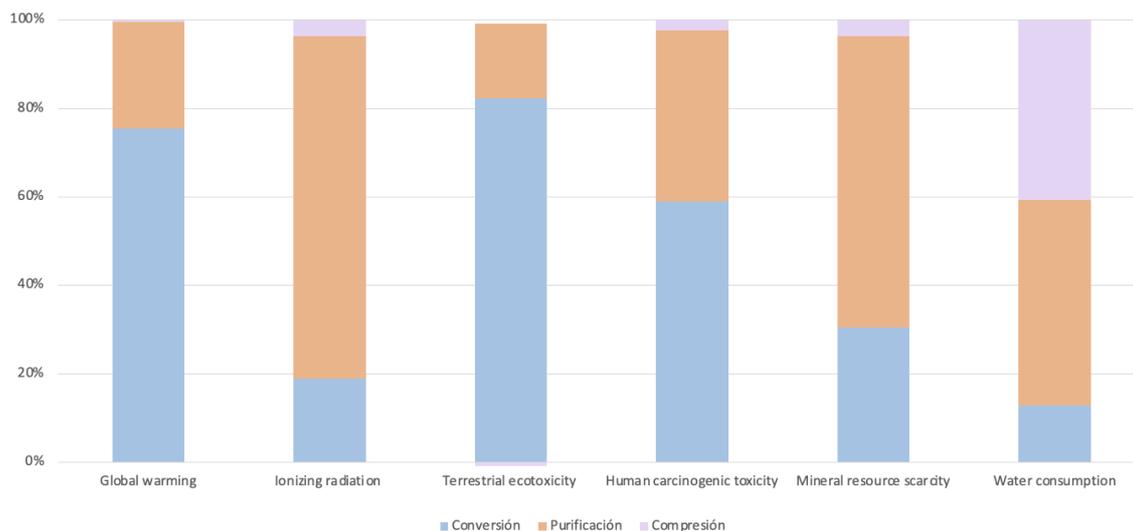


Figura 5-4. Evaluación de categorías de impacto por etapas para SMR

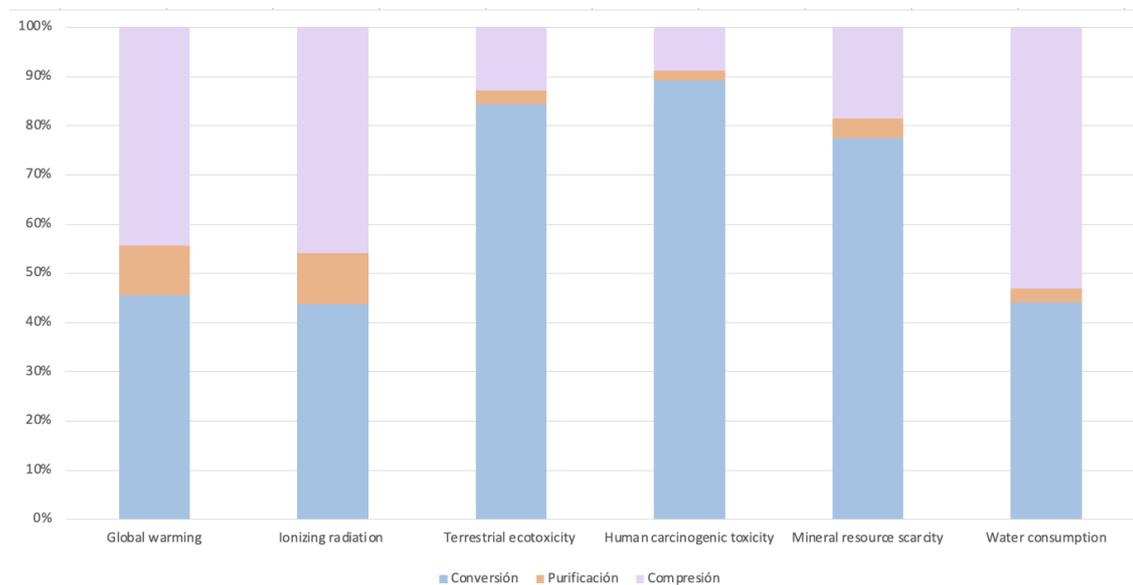


Figura 5-5. Evaluación de categorías de impacto por etapas para electrolizadores ALK

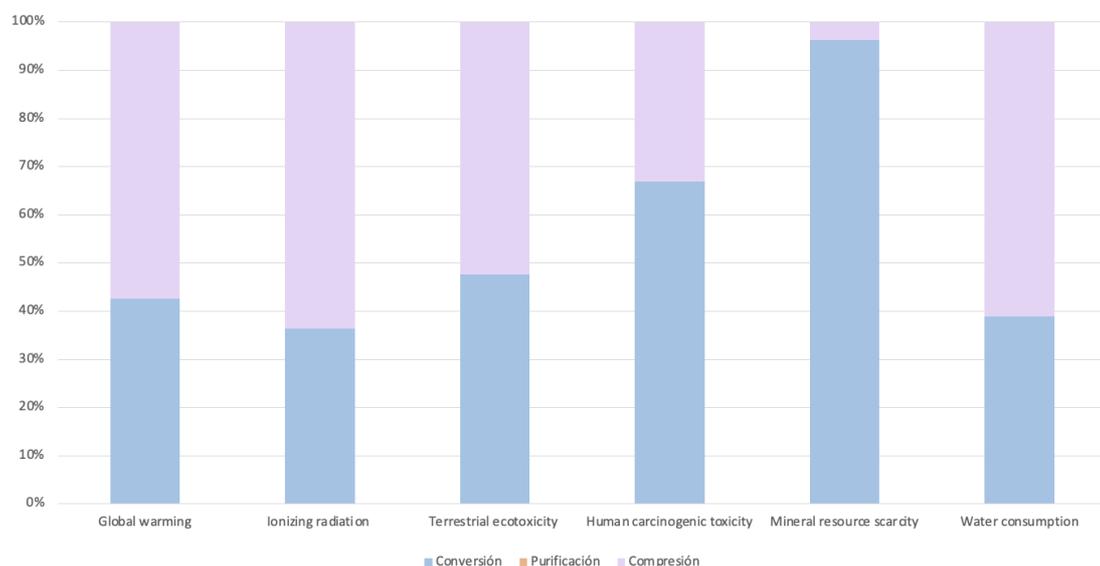


Figura 5-6. Evaluación de categorías de impacto por etapas para electrolizadores PEM

5.3 Conclusiones, limitaciones y recomendaciones

5.3.1 Conclusiones

De acuerdo con el análisis realizado en 5.2 se caracteriza cada tecnología en la Tabla 5-1, en orden de menor a mayor impacto. Luego, se asignan valores del 1 al 3 para completar la tabla, siendo 1 el menor impacto y 3 el mayor impacto.

Tabla 5-1. Comparación del impacto ambiental usando escala de valores

Categoría	Orden			PEM	ALK	SMR
Calentamiento global	PEM	ALK	SMR	1	2	3
Ecotoxicidad terrestre	PEM	ALK	SMR	1	2	3
Radiación ionizante	SMR	PEM	ALK	2	3	1
Toxicidad Humana carcinogénica	PEM	SMR	ALK	1	3	2
Escases de recursos minerales	SMR	ALK	PEM	3	2	1
Consumo de agua	PEM	SMR	ALK	1	3	2
Total				9	15	12

Con estos resultados y considerando los impactos ambientales evaluados, **la electrólisis PEM es el mejor método de producción de hidrógeno de los tres estudiados**. Su diseño compacto, bajo consumo de agua y la eliminación de la etapa de purificación la posicionan como la mejor alternativa, a pesar de los desafíos relacionados con la escasez de recursos minerales.

5.3.2 Limitaciones

La calidad de datos en fue una de las principales limitaciones para comprar la etapa de compresión entre las tres tecnologías.

Aunque los datos fueron revisados y se siguió una metodología para asignar la calidad de los mismos, la variabilidad de los datos de baja calidad no se reflejó adecuadamente en los resultados. Esto se debe a que no se aplicaron técnicas adicionales, como el análisis de gravedad, el análisis de incertidumbre o el análisis de sensibilidad, para abordar dicha variabilidad.

5.3.3 Recomendaciones

Electrólisis Alcalina (ALK): El impacto ambiental en la electrólisis alcalina podría reducirse significativamente si se incorporan procesos de recuperación de acero en el ACV. Se recomienda realizar un análisis exhaustivo para evaluar cómo el reciclaje de acero podría disminuir el impacto en ecotoxicidad terrestre.

SMR (Reformado de Metano con vapor): Es importante mejorar la calidad de los datos sobre el consumo energético en la etapa de purificación (PSA) para el inventario de SMR. Se deben buscar datos más específicos y asegurar la reproducibilidad de los resultados utilizando diversas fuentes de referencia.

Reciclaje de Metales Preciosos (PGMs): Incluir procesos de reciclaje de metales preciosos (PGMs) en el análisis sería un escenario más real, ya que estos por su escasez y costo si o si se van a intentar recuperar, pero seguramente habrá otros impactos asociados a esos procesos de recuperación.

Consumo de Agua: Se sugiere realizar un estudio más detallado y riguroso sobre el consumo de agua, especialmente en lo que respecta a los sistemas de enfriamiento. Si bien los resultados para la electrólisis son confiables, no se tiene certeza sobre el consumo de agua en los sistemas de enfriamiento. Por otra parte, los datos obtenidos están en el mismo orden de magnitud para las tres tecnologías, lo que indica que podría ser un área de mejora, explorando posibles optimizaciones en estos sistemas para reducir su impacto.

Consumo de energía: En este estudio se evidenció que el consumo de energía tuvo gran peso en los impactos a lo largo de las diferentes categorías, por lo que la eficiencia energética en equipos como compresores, sistemas de purificación y electrolizadores es clave para reducir los impactos.

REFERENCIAS

- Addcomposites. (2024, September 26). *Types of Hydrogen Tanks: Technological Differences and Advantages Explained*. <https://www.addcomposites.com/post/types-of-hydrogen-tanks-technological-differences-and-advantages-explained>
- Agarski, B., Nikolić, V., Kamberović, Ž., Anđić, Z., Kosec, B., & Budak, I. (2017). Comparative life cycle assessment of Ni-based catalyst synthesis processes. *Journal of Cleaner Production*, *162*, 7–15. <https://doi.org/10.1016/J.JCLEPRO.2017.06.012>
- Agfa. (2020). *Technical Data Zirfon*. https://www.agfa.com/specialty-products/wp-content/uploads/sites/8/2020/06/TDS_ZIRFON_PERL_UTP_500_20200525.pdf
- Altinkaynak, M., Çelik, D., Kemal YAKUT, A., & Bir Tav Fırının Enerji ve Ekserji Analizi Anahtar Kelimeler Enerji, E. (n.d.). *Energy and Exergy Analysis of an Industrial Annealing Furnace*. <https://doi.org/10.19113/sdufenbed.678843>
- Arnhold, V. (n.d.). *Energy consumption in powder metallurgical manufacturing*. <https://doi.org/10.1179/174329012X13318077875722>
- Badgett, A., Brauch, J., Thatte, A., Rubin, R., Skangos, C., Wang, X., Ahluwalia, R., Pivovarov, B., & Ruth, M. (2023). *Updated Manufactured Cost Analysis for Proton Exchange Membrane Water Electrolyzers*. www.nrel.gov/publications.
- Baraj, E., Ciahotný, K., & Hlinčík, T. (2020). *The water gas shift reaction: Catalysts and reaction mechanism*. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.119817>
- Baraj, E., Ciahotný, K., & Hlinčík, T. (2021). The water gas shift reaction: Catalysts and reaction mechanism. *Fuel*, *288*, 119817. <https://doi.org/10.1016/J.FUEL.2020.119817>
- Bareiß, K., de la Rua, C., Möckl, M., & Hamacher, T. (2019). Life cycle assessment of hydrogen from proton exchange membrane water electrolysis in future energy systems. *Applied Energy*, *237*, 862–872. <https://doi.org/10.1016/J.APENERGY.2019.01.001>
- Bhandari, R., Trudewind, C. A., & Zapp, P. (2014). Life cycle assessment of hydrogen production via electrolysis – a review. *Journal of Cleaner Production*, *85*, 151–163. <https://doi.org/10.1016/J.JCLEPRO.2013.07.048>
- Brauns, J., Schönebeck, J., Kraglund, M. R., Aili, D., Hnát, J., Žitka, J., Mues, W., Jensen, J. O., Bouzek, K., & Turek, T. (2021). Evaluation of Diaphragms and Membranes as Separators for Alkaline Water Electrolysis. *Journal of The Electrochemical Society*, *168*(1), 014510. <https://doi.org/10.1149/1945-7111/ABDA57>
- Brauns, J., & Turek, T. (2020). Alkaline Water Electrolysis Powered by Renewable Energy: A Review. *Processes* *2020*, Vol. 8, Page 248, 8(2), 248. <https://doi.org/10.3390/PR8020248>
- Buttler, A., & Spliethoff, H. (2018). Current status of water electrolysis for energy storage, grid balancing and sector coupling via power-to-gas and power-to-liquids: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, *82*, 2440–2454. <https://doi.org/10.1016/J.RSER.2017.09.003>
- Calidad del Gas - Sistema Gasista - Enagás. (n.d.). Retrieved September 10, 2024, from <https://www.enagas.es/es/gestion-tecnica-sistema/procesos-sistema-gasista/calidad-gas/#tabs-6fc3e0f9c9-item-368c5a3ab1-tab>
- Caplinq. (n.d.). *Porous Transport Layers for Water Electrolyzers | Water Electrolyzers | CAPLINQ*. Retrieved August 24, 2024, from <https://www.caplinq.com/renewable-energy/water-electrolyzers/porous-transport-layers-for-water-electrolyzers/>
- Captura y almacenamiento de CO₂. (n.d.). Retrieved August 17, 2024, from https://zagan.unizar.es/record/48252/files/TAZ-TFG-2015-3344_ANE.pdf
- CHS reciprocating compressor - Hyjack : Hydrogen Online. (n.d.). Retrieved October 6, 2024, from <https://hyjack.tech/ecosystem/product/46>
- Dcycle. (n.d.). *Categorías de Impacto*. Retrieved November 13, 2024, from <https://es.dcycle.io/categorias-de-impacto>

- Delpierre, M., Quist, J., Mertens, J., Prieur-Vernat, A., & Cucurachi, S. (2021). Assessing the environmental impacts of wind-based hydrogen production in the Netherlands using ex-ante LCA and scenarios analysis. *Journal of Cleaner Production*, 299, 126866. <https://doi.org/10.1016/J.JCLEPRO.2021.126866>
- Electric Hydrogen. (2024). *The 100 MW Plant*. <https://eh2.com/wp-content/uploads/2024/08/Pre-NDA-Spec-Sheet-August-2023-1-3.pdf>
- Electrolizador PEM ME450: productos Quest One*. (n.d.). Retrieved October 20, 2024, from <https://www.questone.com/es/productos/detalle/electrolizador-pem-me450-quest-one/me450/>
- Feistel, N. (n.d.). *INFLUENCE OF PISTON RING DESIGN ON THE CAPACITY OF A DRY-RUNNING HYDROGEN COMPRESSOR*.
- Ferraces Azcunaga, A., & López Gestoso, Ó. (2016). *Planta de producción de hidrógeno por reformado de gas natural*. <https://minerva.usc.es/xmlui/handle/10347/18846>
- Firtina, I., Güner, S., & Albostan, A. (2011). Preparation and characterization of membrane electrode assembly (MEA) for PEMFC. *International Journal of Energy Research*, 35(2), 146–152. <https://doi.org/10.1002/ER.1773>
- Fouad, M. A., & Gaber, M. (2019). Recent Adv Petrochem Sci Extraction of Nickel from Spent Catalyst of Primary Reformer Recent Advances in Petrochemical Science. *Recent Adv Petrochem Sci*, 6(3). <https://doi.org/10.19080/RAPSCI.2019.06.555690>
- Gasin. (n.d.). *Purificación de hidrógeno mediante adsorción por oscilación de presión (PSA)*. Retrieved August 14, 2024, from <https://www.gasin.com/equipment/psa-hydrogen-purification>
- Graedel, T. E., Allwood, J., Birat, J.-P., Buchert, M., Hagelüken, C., Reck, B. K., Sibley, S. F., Sonnemann, G., & United Nations Environment Programme. Working Group on the Global Metal Flows. (n.d.). *Recycling rates of metals : a status report*. Retrieved September 23, 2023, from <https://www.resourcepanel.org/reports/recycling-rates-metals>
- Guilera, J., Tarancón, A., Morante, J. R., & Andreu, T. (2020). *Hidrógeno. Vector energético de una economía descarbonizada*. <https://www.researchgate.net/publication/355477614>
- Henkensmeier, D., Cho, W. C., Jannasch, P., Stojadinovic, J., Li, Q., Aili, D., & Jensen, J. O. (2024). Separators and Membranes for Advanced Alkaline Water Electrolysis. *Chemical Reviews*, 124(10), 6393–6443. https://doi.org/10.1021/ACS.CHEMREV.3C00694/ASSET/IMAGES/LARGE/CR3C00694_0030.JPEG
- HeraScientific. (2024). *Horno de Mufla 1100°C 8,2 lt Modelo LHM21*. <https://herascientific.com/producto/horno-de-mufla-1100oc-82-lt-modelo-lhm21/>
- Human Toxicity : BRE Group*. (n.d.). Retrieved November 13, 2024, from <https://tools.bregroup.com/greenguide/page.jsp?id=2098>
- hyfindr. (n.d.). *Electrolyser BoP: Key Components, Safety Protocols & Performance Tips*. Retrieved October 14, 2024, from <https://hyfindr.com/en/hydrogen-knowledge/balance-of-plant-for-electrolyser-bop>
- Ionising radiation (kBq Co-60 eq) | HESTIA*. (n.d.). Retrieved November 13, 2024, from <https://www.hestia.earth/term/ionisingRadiationKbqCo60Eq>
- ISO 14687. (2019). *Hydrogen fuel quality-Product specification Qualité du carburant hydrogène-Spécification de produit COPYRIGHT PROTECTED DOCUMENT*.
- Kadam, R., & Panwar, N. L. (2017). Recent advancement in biogas enrichment and its applications. In *Renewable and Sustainable Energy Reviews* (Vol. 73, pp. 892–903). Elsevier Ltd. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2017.01.167>
- Karacan, C., Lohmann-Richters, F. P., Keeley, G. P., Scheepers, F., Shviro, M., Müller, M., Carmo, M., & Stolten, D. (2022). Challenges and important considerations when benchmarking single-cell alkaline electrolyzers. *International Journal of Hydrogen Energy*, 47(7), 4294–4303. <https://doi.org/10.1016/J.IJHYDENE.2021.11.068>
- Köhler, A. R. (2013). Material Scarcity: A Reason for Responsibility in Technology Development and Product Design. In *Science and Engineering Ethics* (Vol. 19, Issue 3, pp. 1165–1179). <https://doi.org/10.1007/s11948-012-9401-8>

- Krishna, R. (2020). Metrics for Evaluation and Screening of Metal-Organic Frameworks for Applications in Mixture Separations. *ACS Omega*, 5(28), 16987–17004. https://doi.org/10.1021/ACSOMEGA.0C02218/ASSET/IMAGES/MEDIUM/AO0C02218_M012.GIF
- Krishnan, S., Corona, B., Kramer, G. J., Junginger, M., & Koning, V. (2024). Prospective LCA of alkaline and PEM electrolyser systems. *International Journal of Hydrogen Energy*, 55, 26–41. <https://doi.org/10.1016/J.IJHYDENE.2023.10.192>
- Krishnan, S., Koning, V., Theodorus de Groot, M., de Groot, A., Mendoza, P. G., Junginger, M., & Kramer, G. J. (2023). Present and future cost of alkaline and PEM electrolyser stacks. *International Journal of Hydrogen Energy*, 48(83), 32313–32330. <https://doi.org/10.1016/J.IJHYDENE.2023.05.031>
- Kumar, M. (2022). (PDF) *Understanding the physical phenomena limiting the inkjet printed PEM water electrolyzer performance*. https://www.researchgate.net/publication/372782161_Understanding_the_physical_phenomena_limiting_the_inkjet_printed_PEM_water_electrolyzer_performance#pf1a
- Largui, M. (2022). *Estudio tecnico-económico de un sistema FV-H2 para producción, almacenamiento y uso de hidrógeno en una instalación industrial*.
- Li, D., Xu, S., Cai, Y., Chen, C., Zhan, Y., & Jiang, L. (2017). Characterization and Catalytic Performance of Cu/ZnO/Al2O3 Water-Gas Shift Catalysts Derived from Cu-Zn-Al Layered Double Hydroxides. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 56(12), 3175–3183. https://doi.org/10.1021/ACS.IECR.6B04337/SUPPL_FILE/IE6B04337_SI_001.PDF
- Liang, X., Wang, L., Hamdy, M. S., Zhang, K., Sun, K., Wang, Y., Xie, Z., Wu, Q., Bai, X., Chen, H., & Zou, X. (2022). *Status and perspectives of key materials for PEM electrolyzer*. <https://doi.org/10.26599/NRE.2022.9120032>
- Ligen, Y., Vrabel, H., & Girault, H. (2020). Energy efficient hydrogen drying and purification for fuel cell vehicles. *International Journal of Hydrogen Energy*, 45(18), 10639–10647. <https://doi.org/10.1016/J.IJHYDENE.2020.02.035>
- Lozanovski, A., Schuller, O., Faltenbacher Reviewer, M., Board, A., Fullana Palmer, P. I., Bode, M., Finkbeiner, M., & Chomkhamsri, K. (2011). *Guidance Document for performing LCAs on Fuel Cells and H₂ Technologies GUIDANCE DOCUMENT FOR PERFORMING LCA ON HYDROGEN PRODUCTION SYSTEMS Deliverable D3.3-Final guidance document Work Package 3-Preparation and Consultation of the Guidance Document Approved by the X External reviewer X Work Package Leader X Project Coordinator o European Commission / FCH JU*.
- María Villarreal Vives, A., Wang, R., Roy, S., & Smallbone, A. (2023). Techno-economic analysis of large-scale green hydrogen production and storage. *Applied Energy*, 346, 121333. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2023.121333>
- Martinez, O. (2024, March). *¿Qué es el gas natural y para qué sirve esta energía?* <https://preciogas.com/instalaciones/gas-natural/composicion>
- Matute Gomez, G., Uson, C., Yusta Loyo, L., & María, J. (2022). *Modelo técnico y económico de electrolizador para la producción de hidrógeno como vector energético. / Guillermo Matute Gomez*. <http://zagan.unizar.es>
- Mendel Chemicals SRL. (n.d.). Retrieved October 21, 2024, from <https://www.mendelchemicals.com/product/double-side-r2r-coating-equipment-for-battery-electrodes>
- Minke, C., Suermann, M., Bensmann, B., & Hanke-Rauschenbach, R. (2021). Is iridium demand a potential bottleneck in the realization of large-scale PEM water electrolysis? *International Journal of Hydrogen Energy*, 46(46), 23581–23590. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.04.174>
- Minnuo Compressors. (2022). *Diaphragm Compressor – Minnuo Compressor*. https://mncompressor.com/gas_compressor/diaphragm-compressor/
- MITERD. (2020). *Hoja de ruta del hidrógeno: Una apuesta por el hidrógeno renovable*.

- Mittelsteadt, C., Norman, T., Rich, M., & Willey, J. (2015). PEM Electrolyzers and PEM Regenerative Fuel Cells Industrial View. *Electrochemical Energy Storage for Renewable Sources and Grid Balancing*, 159–181. <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-62616-5.00011-5>
- Moreno Soriano, R., Rojas, N., Nieto, E., de Guadalupe González-Huerta, R., & Sandoval-Pineda, J. M. (2021). Influence of the gasket materials on the clamping pressure distribution in a PEM water electrolyzer: Bolt torques and operation mode in pre-conditioning. *International Journal of Hydrogen Energy*, 46(51), 25944–25953. <https://doi.org/10.1016/J.IJHYDENE.2021.03.076>
- mundocompresor.com. (2022). *Tecnología en la compresión de hidrógeno a alta presión*. <https://www.mundocompresor.com/articulos-tecnicos/tecnologia-compresion-hidrogeno-alta-presion>
- Navarro, M. O. (2011). *REFORMADO DE METANO CON TRANSPORTADORES SÓLIDOS DE OXÍGENO-CHEMICAL-LOOPING REFORMING- TESIS DOCTORAL*.
- Nordio, M., Wassie, S. A., Van Sint Annaland, M., Pacheco Tanaka, D. A., Viviente Sole, J. L., & Gallucci, F. (2021). Techno-economic evaluation on a hybrid technology for low hydrogen concentration separation and purification from natural gas grid. *International Journal of Hydrogen Energy*, 46(45), 23417–23435. <https://doi.org/10.1016/J.IJHYDENE.2020.05.009>
- Orlova, S., Mezeckis, N., & Vasudev, V. P. K. (2023). Compression of Hydrogen Gas for Energy Storage: A Review. *Latvian Journal of Physics and Technical Sciences*, 60(2), 4–16. <https://doi.org/10.2478/lpts-2023-0007>
- Paixão da Costa, G., Garcia, D. M. E., Van Nguyen, T. H., Lacharmoise, P., & Simão, C. D. (2024). Advancements in printed components for proton exchange membrane fuel cells: A comprehensive review. *International Journal of Hydrogen Energy*, 69, 710–728. <https://doi.org/10.1016/J.IJHYDENE.2024.05.072>
- Park, H. G., Han, S. Y., Jun, K. W., Woo, Y., Park, M. J., & Kim, S. K. (2019). Bench-Scale Steam Reforming of Methane for Hydrogen Production. *Catalysts 2019*, Vol. 9, Page 615, 9(7), 615. <https://doi.org/10.3390/CATAL9070615>
- Park, J. (2020). *Roll-to-Roll Direct Coating of Catalyst Inks on Membrane Films: Progress and Challenges*.
- Pehl, M., Arvesen, A., Humpenöder, F., Popp, A., Hertwich, E. G., & Luderer, G. (2017). Understanding future emissions from low-carbon power systems by integration of life-cycle assessment and integrated energy modelling. *Nature Energy*, 2(12), 939–945. <https://doi.org/10.1038/s41560-017-0032-9>
- PEM Electrolyzer ME450: H-TEC SYSTEMS products. (n.d.). Retrieved July 30, 2024, from <https://www.h-tec.com/en/products/detail/h-tec-pem-electrolyser-me450/me450/>
- Reyes, A. (2022). *Balance de Planta (BoP) de un Electrolizador | SynerHy*. <https://synerhy.com/2022/02/balance-de-planta-bop-de-un-electrolizador/>
- Sánchez, M. (2023). *Absorción química de CO2 para la obtención de una corriente de metano, procedente de biogás generado en el proceso de digestión anaerobia de una depuradora de aguas residuales urbanas*.
- senzahydrogen. (n.d.). *Comprensión de los componentes del electrolizador PEM y sus funciones*. Retrieved August 24, 2024, from <https://senzahydrogen.com/es/compression-de-los-componentes-del-electrolizador-pem-y-sus-funciones/>
- Shiva Kumar, S., & Himabindu, V. (2019). Hydrogen production by PEM water electrolysis – A review. *Materials Science for Energy Technologies*, 2(3), 442–454. <https://doi.org/10.1016/J.MSET.2019.03.002>
- Steinmann, Z., & Huijbregts, M. (n.d.). *Ionizing radiation*. Retrieved November 13, 2024, from https://lc-impact.eu/documents/Chapter4_Ionizing-radiation.pdf
- Stropnik, R., Lotrič, A., Bernad Montenegro, A., Sekavčnik, M., & Mori, M. (2019). Critical materials in PEMFC systems and a LCA analysis for the potential reduction of environmental impacts with EoL strategies. *Energy Science and Engineering*, 7(6), 2519–2539. <https://doi.org/10.1002/ese3.441>

- Tang, A., Crisci, L., Bonville, L., & Jankovic, J. (2021). An overview of bipolar plates in proton exchange membrane fuel cells. *Journal of Renewable and Sustainable Energy*, 13(2), 22701. https://doi.org/10.1063/5.0031447/15705258/022701_1_ACCEPTED_MANUSCRIPT.PDF
- Technology - Hydron Energy. (n.d.). Retrieved August 20, 2024, from <https://hydron-energy.com/technology/>
- Ursúa, A., Gandía, L. M., & Sanchis, P. (2011). *Hydrogen Production From Water Electrolysis: Current Status and Future Trends*. <https://doi.org/10.1109/JPROC.2011.2156750>
- Valente, A., Iribarren, D., & Dufour, J. (2017). Harmonised life-cycle global warming impact of renewable hydrogen. *Journal of Cleaner Production*, 149, 762–772. <https://doi.org/10.1016/J.JCLEPRO.2017.02.163>
- Valente, A., Iribarren, D., & Dufour, J. (2019). End of life of fuel cells and hydrogen products: From technologies to strategies. *International Journal of Hydrogen Energy*, 44(38), 20965–20977. <https://doi.org/10.1016/J.IJHYDENE.2019.01.110>
- Velasco, A. (2014). *Aprovechamiento de los gases ácidos para la obtención de tiourea a partir de dióxido de carbono y sulfuro de hidrógeno en cianamida de calcio*. <https://cideteq.repositorioinstitucional.mx/jspui/bitstream/1021/336/1/Aprovechamiento%20de%20los%20gases%20C3%A1cidos%20para%20la%20obtenci%C3%B3n%20de%20tiourea%20a%20partir%20de%20dióxido%20de%20carbono%20y%20sulfuro%20de%20hidr%C3%B3geno%20en%20cianamida%20de%20calcio.pdf>
- VPS Vacuum Heatless Dryer – VAPS Technologies. (n.d.). Retrieved August 11, 2024, from <http://vapstechnologies.com/home/vps-vacuum-purge-heatless-dryer/>
- Wang, N., Wang, D., Krook-Riekkola, A., & Ji, X. (2023). MEA-based CO₂ capture: a study focuses on MEA concentrations and process parameters. *Frontiers in Energy Research*, 11, 1230743. <https://doi.org/10.3389/FENRG.2023.1230743/BIBTEX>
- Wilkinson, J., Mays, T., & McManus, M. (2023). Review and meta-analysis of recent life cycle assessments of hydrogen production. *Cleaner Environmental Systems*, 9, 100116. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.cesys.2023.100116>
- Xu, F., Mu, S., & Pan, M. (2010). Recycling of membrane electrode assembly of PEMFC by acid processing. *International Journal of Hydrogen Energy*, 35(7), 2976–2979. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2009.05.087>
- Yakoumis, I., Moschovi, A., Panou, M., & Panias, D. (2020). Single-Step Hydrometallurgical Method for the Platinum Group Metals Leaching from Commercial Spent Automotive Catalysts. *Journal of Sustainable Metallurgy*, 6(2), 259–268. <https://doi.org/10.1007/s40831-020-00272-9>
- Yang, Q. Z., Qi, G. J., Low, H. C., & Song, B. (2011). Sustainable recovery of nickel from spent hydrogenation catalyst: economics, emissions and wastes assessment. *Journal of Cleaner Production*, 19(4), 365–375. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2010.11.007>
- Zhang, Z., Zhang, J., & Zhang, T. (2022). Endplate Design and Topology Optimization of Fuel Cell Stack Clamped with Bolts. *Sustainability*, 14(8), 4730. <https://doi.org/10.3390/su14084730>

ANEXO A. CÁLCULOS

Cálculos adicionales reformado

Solución de MEA

Para caudal de gas natural: 2,4 kg/s; Concentración de amina: 20%

Suposiciones:

- Relación gas-líquido: Para procesos de absorción la relación entre el caudal másico de gas y el flujo másico de solución líquida de amina puede variar 1:1 a 1:5, se asume 1:3 como un valor razonable.
- Tiempo de residencia: Suelen estar entre 1 y 3 minutos, se asume tiempo de residencia en el reactor de 2 minutos, 120 s para el cálculo.
- Flujo de solución de amina: Para relación 1:3 entre gas y líquido, el flujo másico de amina será

$$3 \times 2,4 = 7,2 \text{ kg/s}$$

- Volumen de la solución de amina: Usando la densidad, el flujo volumétrico de la solución de amina es:

$$(7,2 \text{ kg/s}) / (1016 \text{ kg/m}^3) = 0,0071 \text{ m}^3/\text{s}$$

- Volumen del tanque:

$$V_{\text{amina}} \times t_{\text{residencia}} = 0,0071 \text{ m}^3/\text{s} \times 120 \text{ s} = 0,8503 \text{ m}^3$$

Energía (vapor)

Energía consumida: 1,78 MJ/kg CO₂

Energía contenida en el vapor: 2,75 MJ/kg

Suposición: 2,5% de CO₂ en el gas natural

$$\frac{0,025 \times 2,4 \text{ kg} \times \text{s}}{\text{s} \times \mathbf{1,0477 \text{ kg}}} = 0,057 \frac{\text{kg CO}_2}{\text{kg H}_2}$$

Recuperación de Ni

Cálculo del Níquel Recuperado

Níquel lixiviado:

$$0,1 \text{ kg Ni} \times 95\% = 0,095 \text{ kg Ni}$$

Níquel después del enriquecimiento:

$$0.095 \text{ kg Ni} \times 98\% = 0.0931 \text{ kg Ni}$$

Níquel después de la separación del ácido:

$$0.0931 \text{ kg Ni} \times 95\% = 0.0884 \text{ kg NiO}$$

Níquel recuperado (Electrowinning - EW):

$$0.0884 \text{ kg Ni} \times 98\% = 0.0866 \text{ kg Ni (aproximadamente 86.6 g)}$$

Cálculo de HCl Necesario para 1 kg de Catalizador

Suposiciones:

- La reacción química principal es: $\text{NiO} + 2\text{HCl} \rightarrow \text{NiCl}_2 + \text{H}_2\text{O}$
- Todo el níquel metálico se oxida primero a NiO antes de reaccionar con el HCl.

Cantidad estequiométrica de HCl al 100%:

$$\frac{0.1 \text{ kg Ni} \times (2 \text{ mol HCl} / 1 \text{ mol Ni}) \times (36.5 \text{ g HCl} / \text{mol})}{(58.7 \text{ g Ni} / \text{mol})} = 0.124 \text{ kg HCl (100\%)}$$

Conversión a HCl al 37%:

$$0.124 \text{ kg} \times 0.37 \approx 0.335 \text{ kg HCl (37\%)}$$

PSA

El caudal de alimentación al PSA es de 0,554 kmol/s: 2.63×10^{-3} kmol/s CO, 5.21×10^{-1} kmol/s H₂, 1.29×10^{-2} kmol/s CO₂ y 1.46×10^{-2} kmol/s CH₄.

Cálculo de la cantidad de adsorbentes requeridos: El CO se absorberá con la zeolita, para absorción de 2 mol CO/kg de zeolita:

$$\text{Masa de zeolita} = \frac{2.63 \times 10^{-3} \text{ kmol CO} \times 1000 \times \text{kg Zeolita}}{\text{s} \times 2 \text{ mol CO}} = 1.32 \text{ kg}$$

De igual forma, para el carbón activado, este absorbe 2 mol CO₂/kg de carbón activado, requiriéndose 2,63 kg, y 5 mmol CH₄/g de carbón.

$$\text{Carbón activado} = \frac{1.29 \times 10^{-2} \text{ kmol CO}_2 \times 1000 \times \text{kg carbón}}{\text{s} \times 2 \text{ mol CO}_2} = 6.45 \text{ kg}$$

$$\text{Carbón activado} = \frac{1.46 \times 10^{-2} \text{ kmol CH}_4 \times 1 \times 10^6 \text{ mmol} \times \text{g carbón} \times 1 \text{ kg}}{\text{s} \times 5 \text{ mmol CH}_4 \times 1000 \text{ g}} = 2.92 \text{ kg}$$

$$\text{Masa de carbón activado} = 6.45 + 2.92 = 9.38 \text{ kg}$$

Electricidad compresión

Potencia de compresor: 2250 kW para Pentrada: 1 bar, P salida: 200 bar

Pentrada real: 20 bar, P salida real: 200 bar.

Razon de compresión original CR original

$$\frac{P_{salida}}{P_{entrada}} = \frac{200}{1} = 200$$

Nueva relación de compresión CR nueva

$$\frac{P_{salida}}{P_{entrada,nueva}} = \frac{200}{20} = 10$$

Ajuste de potencia

La potencia ideal puede aproximarse proporcionalmente a la potencia del compresor P para un gas ideal puede aproximarse como proporcional a la relación de compresión elevada a una potencia n , comúnmente entre 0.3 y 0.5 para compresores comunes. Asumiendo un exponente $n = 0.3$ (común en ajustes de compresión isentrópica):

$$P_{nueva} = P_{original} \times \left(\frac{CR_{nueva}}{CR_{original}} \right)^n$$

Calculo de la nueva potencia:

$$P_{nueva} = 2250 \times \left(\frac{10}{200} \right)^{0,3} = 916 \text{ kW}$$

Volumen de un anillo de PTFE

El volumen de cada anillo se puede aproximar como el volumen de un cilindro hueco.

$$V_{anillo} = \pi \cdot (r_{externo}^2 - r_{interno}^2) \cdot h$$

$$\text{Diámetro del pistón (interno del anillo): } 200 \text{ mm} \Rightarrow r_{interno} = 100 \text{ mm}$$

$$\text{Grosor del anillo en el radio: } 10 \text{ mm} \Rightarrow r_{externo} = 110 \text{ mm}$$

$$\text{Altura del anillo: } 5 \text{ mm}$$

$$V_{anillo} = \pi \cdot 2100 \cdot 5 \approx 33000 \text{ mm}^3 = 33 \text{ cm}^3$$

Si cada pistón tiene 2 anillos y hay 4 pistones, el volumen total de PTFE usado en los anillos sería:

$$V_{total} = 33 \text{ cm}^3 \cdot 2 \text{ anillos/pistón} \cdot 4 \text{ pistones} = 264 \text{ cm}^3$$

Cálculos adicionales electrólisis alcalina

Fabricación de celdas

Cátodo

$$\text{Dimensiones del cátodo: } 2 \text{ m}^2 \cdot 0,3 \times 10^{-3} \text{ m} = 6 \times 10^{-4} \text{ m}^3$$

$$\text{Densidad: } 500 \text{ g/m}^3$$

$$\text{Masa del cátodo: } 0,3 \text{ g}$$

Diafragma

Densidad: 1g/cm^2
 Grosor: 0,5 mm
 Masa: 0,05g
 Masa ZrO_2 =0,04 g
 Masa PSU= 0,01 g

Ánodo

Energía recocido: 565 kJ/kg para producir 1 kg del material (Altinkaynak et al., n.d.)
 Masa del ánodo: 0,3 g
 Energía celda: $565\text{kJ/kg} * 0,3 \times 10^{-3}\text{ kg} = 0,167\text{ kJ}$
 Gas natural: 36MJ/m^3

$$\frac{0,167 * 10^{-3}\text{MJ} \times \text{m}^3}{36\text{MJ}} = 4,71 * 10^{-3}\text{m}^3$$

Sello y empaques

Densidad PTFE: $2,2\text{ g/cm}^3$
 Área: 2m^2
 Grosor: 0,7 mm (0,45+0,25)
 Volumen: $2\text{m}^2 * 0,7 \times 10^{-3}\text{m} = 1,4 \times 10^{-3}\text{m}^3$

$$\frac{1,4 * 10^{-3}\text{m}^3 \times 2,2 * 10^6\text{ g}}{\text{m}^3} = 3080\text{ g}$$

Platos bipolares

Material: acero al carbono
 Cantidad: 2/celda
 Área: 2m^2
 Grosor: 0,2 mm
 Volumen: $2\text{m}^2 * 0,2 \times 10^{-3}\text{m} = 0,4 \times 10^{-3}\text{ m}^3$
 Densidad: $7,85\text{ g/cm}^3$
 Masa/BPP: 3140 g
 Masa celda: 6280 g

Platos finales

Material: Aluminio
 Cantidad: 2/stack
 Área: 2m^2
 Suposición: grosor del plato es de 20 mm
 Volumen: $2\text{m}^2 * 0,02\text{m} = 0,04\text{ m}^3$
 Masa plato: 314 kg
 Masa platos/stack: 628 kg

Electrólisis

KOH: 30% p/p
 Volumen de tanque: 200 m^3
 Densidad de solución KOH 30%: 1290 kg/m^3
 Masa solución KOH 30% = $1290\text{ kg/m}^3 \times 200\text{ m}^3 = 38700\text{ kg}$
 Masa KOH = $0,3 \times 38700\text{ kg} = 11610\text{ kg}$

Cálculos adicionales Electrólisis PEM

Tabla A-1. Fabricación MEA en la celda PEM

Parámetro	Valor
Área de celda	87.700 mm ² (250 mm x 350,8 mm)
Longitud de recubrimiento	350,8 mm
Velocidad de recubrimiento	750 mm/minuto
Tiempo de recubrimiento	0,468 minutos $\approx 7,80 \times 10^{-3}$ h/celda
Energía recubrimiento	$2,34 \times 10^{-2}$ kWh/celda
Volumen de Nafion	15,8 cm ³
Masa de Nafion	31,6 g

Tabla A-2. Especificaciones ánodo

Descripción	Valor
Material del ánodo	Titanio en polvo
Forma	Láminas de 250 μ m de grosor
Porosidad	30%
Densidad (sin porosidad)	4,51 g/cm ³
Densidad efectiva (con porosidad)	3,16 g/cm ³
Área de la lámina	877 cm ²
Grosor de la lámina	0,025 cm
Volumen del titanio	21,925 cm ³
Masa del titanio	69,22 g
Masa por celda	138,44 g

Energía del sinterizado: 5 kWh/kg x 0,0692 kg = 0,3461 kWh

Tabla A-3. Especificaciones de los sellos

Parámetro	Valor
Área externa	936,36 cm ²
Área interna	877 cm ²
Área del marco	60,2 cm ²
Material	Termoplástico fenilsulfuro
Densidad	1,3 g/cm ³
Volumen de PPS	5,418 cm ³
Masa del marco	7,043 g
Masa total en la celda	14,086 g

Recomendaciones para Inventarios Fin de vida

Las acciones relacionadas con el fin de vida de los materiales críticos son de vital importancia, tal como señala (Stropanik et al., 2019) A medida que se disponga de más datos, se sugiere priorizar un enfoque en este aspecto, considerando que las acciones de desmantelamiento, como el reciclaje, presentan un impacto ambiental reducido al compensar los materiales recuperados en la etapa de fabricación.

Se propone prestar especial atención a materiales como el iridio (Ir), Nafion (por su peligrosidad), y titanio (Ti), cuyos porcentajes de recuperación pueden ser significativos. Por ejemplo, estudios como los de (Graedel et al., n.d.) reportan tasas de reciclado del 50% para el Ir, 90% para el platino (Pt), y 91% para el Ti, mientras que el aluminio alcanza un 96%, el acero un 84%, y plásticos como PP y HDPE también logran un 84%.

Se recomienda un enfoque sistemático en el reciclaje de los PGMs (metales del grupo del platino), priorizando el desarrollo de procesos integrales que permitan recuperar tanto los metales preciosos como otros materiales del MEA (membrana-electrodo ensamblado). Por ejemplo, (Yakoumis et al., 2020) proponen un método eficiente que, mediante reactivos de baja acidez y temperaturas suaves (70 °C), permite recuperar el 100% del platino utilizando reactivos como HCl (37%), NaCl (4.5 M), y H₂O₂ (1% v/v), siguiendo principios de química verde. Este método también puede aplicarse para recuperar el platino de los platos bipolares, con una eficiencia estimada del 90%.

A futuro, se recomienda estimar de manera más precisa los insumos y residuos generados por este proceso. Por ejemplo, con base en la masa del MEA y el número total de celdas (252*2*3), podría calcularse la cantidad de agua residual y reactivos necesarios, considerando un factor S/L del 70%. Además, es relevante explorar métodos adicionales como el de (Xu et al., 2010) que no solo permiten recuperar el 90% del platino, sino también regenerar la membrana de Nafion en su totalidad, lo que abre posibilidades para su reutilización.

Sin embargo, una limitación actual es la falta de información sobre procesos de recuperación del iridio. Se recomienda realizar investigaciones adicionales en este ámbito para diseñar estrategias más completas de reciclaje.

ANEXO B. INVENTARIOS

Tabla B1. Inventario SMR (Reformado de metano con vapor)

Item	Nombre	Tipo	Sección	Sub-sección	Referencia datos	Valor	Unid.	Por u.f.	Unid.
1	Niquel (cátodo)	Entrada	Conversión (electrólisis)	Fabricación de celdas	(Karacan et al., 2022). Tabla (3-13)	3.00.E-01	g/celda	5.90.E-05	g/uf
2	ZrO2 (diafragma)	Entrada	Conversión (electrólisis)	Fabricación de celdas	Agfa, 2020. Tabla (3-13)	4.00.E-02	g/celda	7.87.E-06	g/uf
3	Polisulfona (diafragma)	Entrada	Conversión (electrólisis)	Fabricación de celdas	Henkensmeier et al., 2024. Tabla (3-13)	1.00.E-02	g/celda	1.97.E-06	g/uf
4	Energía recocido (gas natural) (ánodo)	Entrada	Conversión (electrólisis)	Fabricación de celdas	(Altinkaynak et al., n.d.). Tabla (3-13)	5.65.E+02	kJ/kg	9.27.E-07	m3/uf
5	Niquel (ánodo)	Salida	Conversión (electrólisis)	Fabricación de celdas	(Karacan et al., 2022). Tabla (3-13)	3.00.E-01	g/celda	5.90.E-05	g/uf
6	Sellos y juntas (PTFE)	Salida	Conversión (electrólisis)	Fabricación de celdas	(Karacan et al., 2022). Tabla (3-13)	3.08.E+03	g/celda	6.06.E-01	g/uf
7	Platos bipolares (acero al carbono)	Entrada	Conversión (electrólisis)	Fabricación de celdas	(Krishnan et al., 2024). Tabla (3-13)	6.28.E+03	g/celda	1.24.E+00	g/uf
8	Platos finales (acero al carbono)	Entrada	Conversión (electrólisis)	Integración de stacks	(Krishnan et al., 2024). Tabla (3-13)	6.28.E+02	kg/stack	1.24.E-03	kg/uf
9	Cobre	Entrada	Conversión (electrólisis)	Ensamble con BoP	Autor. Tabla (3-14)	2.00.E+04	kg/BoP	1.31.E-04	kg/uf
10	Acero	Entrada	Conversión (electrólisis)	Ensamble con BoP	Autor. Tabla (3-14)	7.50.E+04	kg/BoP	4.92.E-04	kg/uf

Item	Nombre	Tipo	Sección	Sub-sección	Referencia datos	Valor	Unid.	Por u.f.	Unid.
11	Materiales plásticos	Entrada	Conversión (electrólisis)	Ensamble con BoP	Autor. Tabla (3-14)	5.00.E+03	kg/BoP	3.28.E-05	kg/uf
12	Plásticos	Entrada	Conversión (electrólisis)	Ensamble con BoP	Autor. Tabla (3-14)	1.50.E+03	kg/BoP	9.84.E-06	kg/uf
13	Aleacion de acero	Entrada	Conversión (electrólisis)	Ensamble con BoP	Autor. Tabla (3-14)	6.00.E+03	kg/BoP	3.94.E-05	kg/uf
14	Material absorbente	Entrada	Conversión (electrólisis)	Ensamble con BoP	Autor. Tabla (3-14)	4.50.E+03	kg/BoP	2.95.E-05	kg/uf
15	componentes electronicos	Entrada	Conversión (electrólisis)	Ensamble con BoP	Autor. Tabla (3-14)	8.00.E+02	kg/BoP	5.25.E-06	kg/uf
16	Agua desionizada	Entrada	Conversión (electrólisis)	Electrólisis	Electric Hydrogen, 2024	1.50.E+01	L/kg H2	1.50.E+01	kg/uf
17	Energía eléctrica (renovable)	Entrada	Conversión (electrólisis)	Electrólisis	(Krishnan et al., 2024). Ecuación (3-24)	96	%Energía	5.25.E-02	MWh/uf
18	Energía eléctrica (de la red)	Entrada	Conversión (electrólisis)	Electrólisis	(Krishnan et al., 2024). Ecuación (3-24)	4	%Energía	2.11.E-03	MWh/uf
19	KOH	Entrada	Conversión (electrólisis)	Electrólisis	Brauns & Turek, 2020. Ecuación (3-25)	1.16.E+04	kg KOH/sistema	7.62.E-04	kg/uf
20	Energía	Entrada	Purificación		Ligen et al., 2020	5.00.E-01	kWh/kgH2	5.00.E-01	kWh/kgH2
21	Gases residuales VPSA (N2,O2,H2O)	Salida	Purificación		Ligen et al., 2020. Ecuación (3-26)	6.84.E+01	kg/h	3.73.E-02	kg/uf
22	Energía compresión	Entrada	Compresión		Minnuo Compressors., 2022. Ecuación (3-27)	4.00.E+03	kW	2.18.E+00	kWh/uf

Item	Nombre	Tipo	Sección	Sub-sección	Referencia datos	Valor	Unid.	Por u.f.	Unid.
23	Agua enfriamiento	Entrada	Compresión		Suposición	2.00.E+00	m3/h	2.00.E+01	kg/uf
24	Valvula DN 125	Entrada	Compresión	Mantenimiento	Suposición y ecuación (3-28)	5.00.E+00	p/compresor	1.38.E-05	p/uf
25	Diafragma Viton o PTFE	Entrada	Compresión	Mantenimiento	Suposición y ecuación (3-28)	4.00.E+00	kg/compresor	1.10.E-05	kg/uf
26	Valvula DN 125	Salidas	Compresión	Mantenimiento	Suposición y ecuación (3-28)			1.38.E-05	p/uf
27	Diafragma de PTFE	Salidas	Compresión	Mantenimiento	Suposición y ecuación (3-28)			1.10.E-05	kg/uf

Tabla B2. Calidad de datos SMR

I ¹	A ²	G ³	S ⁴	C ⁵	R ⁶	Ca ⁷	Back-ground	Comentarios back-ground	A	G	S	C	R	Ca	Calidad datos (Ítem)
1	3	3	3	3	3	30	Natural gas, high pressure {ES} market for natural gas, high pressure Cut-off, U	Se selecciona de combustibles a baja presión que es como suele usarse en plantas de reformado, además se selecciona mercado español.	3	3	3	3	3	30	HIGH
2	3	2	3	1	3	25	Methylamine {RER} market for methylamine Cut-off, U	Se selecciona porque se refiere a region europa.	3	3	3	3	3	30	HIGH

¹ Item² Age³ Geographical origin⁴ Source⁵ Completeness⁶ Reproducibility⁷ Calidad de datos

I ¹	A ²	G ³	S ⁴	C ⁵	R ⁶	Ca ⁷	Back-ground	Comentarios back-ground	A	G	S	C	R	Ca	Calidad datos (ítem)
3	2	1	1	2	2	16	Steam, in chemical industry {RER} market for steam, in chemical industry Cut-off, U	Se selecciona porque e refiere a mercado de vapor en industria química en Europa.	3	3	3	3	3	30	HIGH
4	3	3	3	3	3	30	Water, deionised {Europe without Switzerland} market for water, deionised Cut-off, U	Se selecciona agua desionizada que es la usada en preparación de MEA, además el mercado Europeo.	3	3	3	3	3	30	HIGH
5	3	2	3	3	3	29	Water, deionised {Europe without Switzerland} market for water, deionised Cut-off, U	Se selecciona agua desionizada que es la usada en preparación de MEA, además el mercado Europeo.	3	3	3	3	3	30	HIGH
6	3	2	3	2	3	27			3	2	3	2	3	27	HIGH
7	2	3	3	3	2	26	Steam, in chemical industry {RER} market for steam, in chemical industry Cut-off, U	Mercado Europeo hasta 2022, No especifica temperatura o presión.	3	3	3	2	2	26	HIGH
8							Modelado								
9	2	3	2	2	3	23	Nickel, class 1 {RU} platinum group metal mine operation, ore with high palladium content Cut-off, U	Este background cubre las actividades de extracción desde la mina y aplica para fabricación de catalizadores en química. Basados en un estudio de autocatalisis en alemania y modelado para rusia, incluye todas las actividades de transformación desde la mina. No incluye transporte.	3	3	2	2	2	23	HIGH
10	2	3	2	2	3	23	Nitric acid, without water, in 50% solution state {RER w/o RU} market for nitric acid, without water, in 50% solution state Cut-off, U	Mercado europeo, año 2022, tratamientos de superficie y catalizadores. Corresponde a niquel al 50% y no al 60% como nuestro modelo. Considera transporte entre productores y consumidores.	3	3	3	3	3	30	HIGH
11	2	3	2	2	3	23	Water, deionised {Europe without Switzerland} market for water, deionised Cut-off, U	Mercado europeo, hasta año 2022. Considera el transporte.	3	3	3	3	3	30	HIGH

I ¹	A ²	G ³	S ⁴	C ⁵	R ⁶	Ca ⁷	Back-ground	Comentarios back-ground	A	G	S	C	R	Ca	Calidad datos (ítem)
21	1	2	1	2	1	13	Nitrogen oxides, ES								
22	1	2	1	2	1	13	Particulates, < 2.5 um								
23	3	2	2	2	2	22	Electricity, medium voltage {ES} market for electricity, medium voltage Cut-off, U	Corresponde a medio voltaje en España, corresponde al sector industrial de media y baja escala hasta 2022.	3	3	3	3	3	30	HIGH
24							Electricity, medium voltage {ES} market for electricity, medium voltage Cut-off, U	Corresponde a medio voltaje en España, corresponde al sector industrial de media y baja escala hasta 2022.	3	3	3	3	3		
25	3	3	2	2	2	23	Carbon dioxide, fossil	Corresponde a emisiones atmosféricas de origen fósil.	3	3	3	3	3	30	HIGH
26	3	2	2	2	2	22	Steam, in chemical industry {RER} market for steam, in chemical industry Cut-off, U	Mercado Europeo hasta 2022, No especifica temperatura o presión.	1	1	2	3	2	19	MEDIUM
27	2	3	3	3	2	26	Modelado								
28	3	3	2	2	2	23	Iron ore, crude ore, 63% Fe {GLO} market for iron ore, crude ore, 63% Fe Cut-off, U	Este mineral corresponde a hematita con pureza del 63% que es la mas usada en la fabricació de catalizadores. Mercado global hasta 2022. Incluye transporte	3	2	3	3	3	29	HIGH
29	3	3	2	2	2	23	Chromium trioxide, flakes {RER} chromium trioxide production, flakes Cut-off, U	Mercado de oxido de cromo aplicaciones de electroquímicas. Inventario modelado para Europa hasta 2022.	3	3	3	3	3	30	HIGH
30	3	2	1	1	2	17	Electricity, low voltage {RER} market group for electricity, low voltage Cut-off, U	Se selecciona electricidad de baja tensión porque se plantea la producción de un kilogramo de catalizador a nivel laboratorio. Corresponde a baja tensión para Europa ya que los fabricantes se encuentran en Alemania o Dinamarca.	3	3	3	3	3	30	HIGH
31	2	2	2	2	2	20	Modelado		3	1	2	3	2	23	HIGH

I ¹	A ²	G ³	S ⁴	C ⁵	R ⁶	Ca ⁷	Back-ground	Comentarios back-ground	A	G	S	C	R	Ca	Calidad datos (Ítem)
32	3	2	2	2	2	22	Copper oxide {GLO} market for copper oxide Cut-off, U	Mercado global hasta 2022, considera el transporte.	3	1	2	2	2	21	HIGH
33	3	2	2	2	2	22	Zinc oxide {GLO} market for zinc oxide Cut-off, U	Mercado global hasta 2022, considera el transporte.	3	1	2	2	2	21	HIGH
34	3	2	2	2	2	22	Aluminium oxide, non-metallurgical {IAI Area, EU27 & EFTA} market for aluminium oxide, non-metallurgical Cut-off, U	Mercado union Europea hasta 2022, considera el transporte.	3	1	2	2	2	21	HIGH
35	3	2	2	2	2	22	Sodium hydroxide, without water, in 50% solution state {GLO} market for sodium hydroxide, without water, in 50% solution state Cut-off, U	Mercado para hidroxido de sodio a nivel global hasta 2022.	3	1	2	2	2	21	HIGH
36	3	2	2	2	2	22	Electricity, low voltage {RER} market group for electricity, low voltage Cut-off, U	Se selecciona electricidad de baja tensión porque se plantea la producción de un kilogramo de catalizador a nivel laboratorio. Corresponde a baja tensión para Europa ya que los fabricantes se encuentran en Alemania o Dinamarca.	2	1	2	3	2	21	HIGH
37	3	2	3	2	2	25	Electricity, medium voltage {ES} market for electricity, medium voltage Cut-off, U	Instalaciones industriales, consumen energía de meddio voltaje, inventario modelado para España hasta 2023 para pequeña y media escala.	3	2	2	3	3	26	HIGH
38	3	3	2	2	2	23	Carbon dioxide, in chemical industry {GLO} market for carbon dioxide, in chemical industry Cut-off, U	Mercado global hasta 2023 para Dióxido de carbono usado en la industria química.	3	1	3	3	3	28	HIGH
39						0	Zeolite, powder {GLO} market for zeolite, powder Cut-off, U	Mercado global hasta 2023 para producción de 4kg de polvo de zeolita.	3	1	3	3	3	28	
40	3	3	2	2	2	23	Activated carbon, granular {GLO} market for activated carbon, granular Cut-off, U	Mercado global hasta 2023, para producir 1Kg de carbon activado granulado.	3	1	3	3	3	28	

I ¹	A ²	G ³	S ⁴	C ⁵	R ⁶	Ca ⁷	Back-ground	Comentarios back-ground	A	G	S	C	R	Ca	Calidad datos (ítem)
41	3	2	1	1	1	15	Electricity, medium voltage {ES} market for electricity, medium voltage Cut-off, U	Inventario para mercado Español hasta 2023. Industrias pequeñas y medianas	3	3	3	3	3	30	HIGH
42	2	3	3	2	2	24	Water, completely softened {RER} market for water, completely softened Cut-off, U	Se selecciona agua suave para sistemas de enfriamiento, y no se consideran purgas. Se elige de RER correspondiente a mercado europeo.	3	3	3	3	3	30	HIGH
43	3	3	1	1	1	16	Electricity, medium voltage {ES} market for electricity, medium voltage Cut-off, U	Inventario para mercado Español hasta 2023. Industrias pequeñas y medianas	3	3	3	3	3	30	HIGH
44	3	3	3	2	2	26	Tetrafluoroethylene {GLO} market for tetrafluoroethylene Cut-off, U	Mercado modelado a nivel global hasta 2023.	3	2	2	1	2	20	MEDIUM
45	3	3	3	2	2	26	Hazardous waste, for incineration {Europe without Switzerland} market for hazardous waste, for incineration Cut-off, U	Se supone que el PTFE no se recicla y va a vertedero donde se incinera.	3	1	2	1	1	17	MEDIUM
46	3	1	1	1	1	14	Water, cooling, unspecified natural origin, ES		3	3	3	3	3	30	HIGH

Tabla B3. Inventario ALK (Electrolizador Alcalino)

Item	Nombre	Tipo	Sección	Sub-sección	Referencia datos	Valor	Unid.	Por u.f.	Unid.
1	Niquel (cátodo)	Entrada	Conversión (electrólisis)	Fabricación de celdas	(Karacan et al., 2022). Tabla (3-13)	3.00.E-01	g/celda	5.90.E-05	g/uf
2	ZrO2 (diafragma)	Entrada	Conversión (electrólisis)	Fabricación de celdas	Agfa, 2020. Tabla (3-13)	4.00.E-02	g/celda	7.87.E-06	g/uf
3	Polisulfona (diafragma)	Entrada	Conversión (electrólisis)	Fabricación de celdas	Henkensmeier et al., 2024. Tabla (3-13)	1.00.E-02	g/celda	1.97.E-06	g/uf

Item	Nombre	Tipo	Sección	Sub-sección	Referencia datos	Valor	Unid.	Por u.f.	Unid.
4	Energía recocido (gas natural) (ánodo)	Entrada	Conversión (electrólisis)	Fabricación de celdas	(Altinkaynak et al., n.d.). Tabla (3-13)	5.65.E+02	kJ/kg	9.27.E-07	m3/uf
5	Niquel (ánodo)	Salida	Conversión (electrólisis)	Fabricación de celdas	(Karacan et al., 2022). Tabla (3-13)	3.00.E-01	g/celda	5.90.E-05	g/uf
6	Sellos y juntas (PTFE)	Salida	Conversión (electrólisis)	Fabricación de celdas	(Karacan et al., 2022). Tabla (3-13)	3.08.E+03	g/celda	6.06.E-01	g/uf
7	Platos bipolares (acero al carbono)	Entrada	Conversión (electrólisis)	Fabricación de celdas	(Krishnan et al., 2024). Tabla (3-13)	6.28.E+03	g/celda	1.24.E+00	g/uf
8	Platos finales (acero al carbono)	Entrada	Conversión (electrólisis)	Integración de stacks	(Krishnan et al., 2024). Tabla (3-13)	6.28.E+02	kg/stack	1.24.E-03	kg/uf
9	Cobre	Entrada	Conversión (electrólisis)	Ensamble con BoP	Autor. Tabla (3-14)	2.00.E+04	kg/BoP	1.31.E-04	kg/uf
10	Acero	Entrada	Conversión (electrólisis)	Ensamble con BoP	Autor. Tabla (3-14)	7.50.E+04	kg/BoP	4.92.E-04	kg/uf
11	Materiales plásticos	Entrada	Conversión (electrólisis)	Ensamble con BoP	Autor. Tabla (3-14)	5.00.E+03	kg/BoP	3.28.E-05	kg/uf
12	Plásticos	Entrada	Conversión (electrólisis)	Ensamble con BoP	Autor. Tabla (3-14)	1.50.E+03	kg/BoP	9.84.E-06	kg/uf
13	Aleacion de acero	Entrada	Conversión (electrólisis)	Ensamble con BoP	Autor. Tabla (3-14)	6.00.E+03	kg/BoP	3.94.E-05	kg/uf
14	Material absorbente	Entrada	Conversión (electrólisis)	Ensamble con BoP	Autor. Tabla (3-14)	4.50.E+03	kg/BoP	2.95.E-05	kg/uf
15	componentes electronicos	Entrada	Conversión (electrólisis)	Ensamble con BoP	Autor. Tabla (3-14)	8.00.E+02	kg/BoP	5.25.E-06	kg/uf
16	Agua desionizada	Entrada	Conversión (electrólisis)	Electrólisis	Electric Hydrogen, 2024	1.50.E+01	L/kg H2	1.50.E+01	kg/uf

Item	Nombre	Tipo	Sección	Sub-sección	Referencia datos	Valor	Unid.	Por u.f.	Unid.
17	Energía eléctrica (renovable)	Entrada	Conversión (electrólisis)	Electrólisis	(Krishnan et al., 2024). Ecuación (3-24)	96	%Energía	5.25.E-02	MWh/uf
18	Energía eléctrica (de la red)	Entrada	Conversión (electrólisis)	Electrólisis	(Krishnan et al., 2024). Ecuación (3-24)	4	%Energía	2.11.E-03	MWh/uf
19	KOH	Entrada	Conversión (electrólisis)	Electrólisis	Brauns & Turek, 2020. Ecuación (3-25)	1.16.E+04	kg KOH/sistema	7.62.E-04	kg/uf
20	Energía	Entrada	Purificación		Ligen et al., 2020	5.00.E-01	kWh/kgH2	5.00.E-01	kWh/kgH2
21	Gases residuales VPSA (N2,O2,H2O)	Salida	Purificación		Ligen et al., 2020. Ecuación (3-26)	6.84.E+01	kg/h	3.73.E-02	kg/uf
22	Energía compresión	Entrada	Compresión		Minnuo Compressors., 2022. Ecuación (3-27)	4.00.E+03	kW	2.18.E+00	kWh/uf
23	Agua enfriamiento	Entrada	Compresión		Suposición	2.00.E+00	m3/h	2.00.E+01	kg/uf
24	Valvula DN 125	Entrada	Compresión	Mantenimiento	Suposición y ecuación (3-28)	5.00.E+00	p/compresor	1.38.E-05	p/uf
25	Diafragma Viton o PTFE	Entrada	Compresión	Mantenimiento	Suposición y ecuación (3-28)	4.00.E+00	kg/compresor	1.10.E-05	kg/uf
26	Valvula DN 125	Salidas	Compresión	Mantenimiento	Suposición y ecuación (3-28)			1.38.E-05	p/uf
27	Diafragma de PTFE	Salidas	Compresión	Mantenimiento	Suposición y ecuación (3-28)			1.10.E-05	kg/uf

Tabla B4. Calidad de datos ALK

I	A	G	S	C	R	Ca	Back-ground	Comentarios back-ground	A	G	S	C	R	CA	Calidad datos (Ítem)
1	3	2	1	3	2	21	Nickel, class 1 {GLO} market for nickel, class 1 Cut-off, U	Modelado a nivel global hasta 2023. El níquel clase 1 se suele usar como electrodo.	3	1	2	3	2	23	HIGH
2	3	3	3	1	1	22	Zirconium oxide {GLO} market for zirconium oxide Cut-off, U	Mercado global hasta 2023.	3	1	2	2	2	21	HIGH
3	3	2	1	2	2	19	Polyphenylene sulfide {GLO} market for polyphenylene sulfide Cut-off, U	No se encuentra polisulfona pero si el polifenilsulfuro PPS. También es un termoplástico y se suele usar en la misma aplicación. Mercado global hasta 2023.	3	1	1	1	1	14	MEDIUM
4	3	1	3	3	2	26	Natural gas, high pressure {ES} market for natural gas, high pressure Cut-off, U	Mercado 2023. España.	3	3	3	3	2	28	HIGH
5	3	2	1	3	2	21	Nickel, class 1 {GLO} market for nickel, class 1 Cut-off, U	Modelado a nivel global hasta 2023. El níquel clase 1 se suele usar como electrodo.	3	1	3	3	2	26	HIGH
6	3	3	3	2	2	26	Polyethylene, high density, granulate {GLO} market for polyethylene, high density, granulate Cut-off, U	Inventario global hasta 2023. Corresponde al PTFE pero no a la hoja del ancho requerido.	3	1	1	2	2	18	MEDIUM
7	3	3	2	2	2	23	Steel, low-alloyed {GLO} market for steel, low-alloyed Cut-off, U	Se selecciona porque corresponde a aluminio con baja aleacion de metales como Ni, por ejemplo. Corresponde a mercado global hasta 2023.	3	1	2	2	2	21	HIGH
8	3	3	1	2	2	20	Steel, low-alloyed {GLO} market for steel, low-alloyed Cut-off, U	Mercado global hasta 2023.	3	1	2	3	2	23	HIGH
9	3	3	1	1	1	16	Copper-rich materials {GLO} market for copper-rich materials Cut-off, U	Mercado genérico a nivel global hasta 2023. Usado en conductores y bobinas.	3	1	2	2	1	19	MEDIUM
10	3	3	1	1	1	16	Steel, low-alloyed, hot rolled {GLO} market for steel, low-alloyed, hot rolled Cut-off, U	Inventario mercado global hasta 2023. Usado en estructuras por su alta resistencia y durabilidad.	3	2	2	2	1	20	MEDIUM
11	3	3	1	1	1	16	Polycarbonate {RER} market for polycarbonate Cut-off, U	Plastico usado en electrica y electronic, inventario modelado para europa hasta 2023.	3	2	2	2	1	20	MEDIUM

I	A	G	S	C	R	Ca	Back-ground	Comentarios back-ground	A	G	S	C	R	CA	Calidad datos (ítem)
12	3	3	1	1	1	16	Polypropylene, granulate {GLO} market for polypropylene, granulate Cut-off, U	Inventario modelado a nivel global. Usado en tanques y tuberías por sus resistencia a la corrosión.	3	1	2	2	1	19	MEDIUM
13	3	3	1	1	1	16	Steel, low-alloyed {GLO} market for steel, low-alloyed Cut-off, U	Inventario modelado a nivel global hasta 2023. Resistente a la corrosión por alcalis.	3	1	2	2	1	19	MEDIUM
14	3	3	1	1	1	16	Activated silica {GLO} market for activated silica Cut-off, U	Mercado global hasta 2023. Usado en sistemas de purificación de gases.	3	1	2	2	1	19	MEDIUM
15	3	3	1	1	1	16	Electronic component, passive, unspecified {GLO} market for electronic component, passive, unspecified Cut-off, U	Inventario global a 2023. Componentes que controlan el flujo de la electricidad de forma pasiva, como conductores o transformadores.	3	1	2	2	1	19	MEDIUM
16	3	3	3	3	3	30	Water, deionised {Europe without Switzerland} market for water, deionised Cut-off, U	Mercado Europa, al 2023.	3	1	2	3	3	25	HIGH
17	3	3	3	3	3	30	Electricity, high voltage {CH} electricity, high voltage, wind power, import from Germany Cut-off, U	Representa un proceso que involucra importar a nueva york desde Suiza. Inventario hasta 2023.	3	1	2	2	1	19	MEDIUM
18	3	3	3	3	3	30	Electricity, high voltage {ES} market for electricity, high voltage Cut-off, U	Inventario de 2020, para España, country mix alto voltaje	3	3	3	3	3	30	HIGH
19	3	3	3	3	3	30	Potassium hydroxide {GLO} market for potassium hydroxide Cut-off, U	suministro global modelado hasta 2023.	3	2	2	3	3	26	HIGH
20	3	2	3	3	3	29	Electricity, medium voltage {ES} market for electricity, medium voltage Cut-off, U	Inventario españa, hasta 2023 medio voltaje.	3	3	3	3	3	30	HIGH
21	3	2	2	2	2	22	Se quemán y recirculan para el Reformador, la cuantificación de las emisiones de CO2 están en el reformado.								
22	3	3	1	1	1	16	Electricity, medium voltage {ES} market for electricity, medium voltage Cut-off, U	Inventario españa, hasta 2023 medio voltaje.	3	3	3	3	3	30	HIGH

I	A	G	S	C	R	Ca	Back-ground	Comentarios back-ground	A	G	S	C	R	CA	Calidad datos (ítem)
23	3	1	1	1	1	14	Tap water {RER} market group for tap water Cut-off, U	Inventario para Europa hasta 2023	3	2	3	3	3	29	HIGH
24	3	3	2	2	2	23	Exhaust air valve, in-wall housing, plastic/steel, DN 125 {GLO} market for exhaust air valve, in-wall housing, plastic/steel, DN 125 Cut-off, U		3	1	2	2	2	21	HIGH
25	3	3	2	2	2	23	Acrylonitrile-butadiene-styrene copolymer {GLO} market for acrylonitrile-butadiene-styrene copolymer Cut-off, U		3	1	1	2	1	16	MEDIUM
26	3	3	2	2	2	23	Used exhaust air valve in-wall housing, plastic/steel {CH} market for used exhaust air valve in-wall housing, plastic/steel Cut-off, U	Mercado hasta 2022 Suiza.	3	1	2	2	2	21	HIGH
27	3	2	2	2	2	22	Waste mass, total, placed in landfill	El PTFE no tiene alto potencial de reciclaje. Se supone landfill.	3	1	1	1	1	14	MEDIUM

Tabla B5. Inventario PEM (Electrolizador PEM)

Item	Nombre	Tipo	Sección	Sub-sección	Referencia datos	Valor	Unid.	Por u.f.	Unid.
1	Pt cátodo	Entrada	Fabricación de celda	CCM	Badgett et al., 2023. Ecuación(3-29)	8.77.E+02	mg/celda	3.55.E-01	mg/uf
2	IrO2 ánodo	Entrada	Fabricación de celda	CCM	Badgett et al., 2024. Ecuación (3-29)	1.75.E+03	mg/celda	7.10.E-01	mg/uf

Item	Nombre	Tipo	Sección	Sub-sección	Referencia datos	Valor	Unid.	Por u.f.	Unid.
3	Nafion	Entrada	Fabricación de celda	CCM	Badgett et al., 2025. Ecuación (3-29)	3.16.E+01	g/celda	1.28.E-02	g/uf
4	Energía recubrimiento celda	Entrada	Fabricación de celda	CCM	Mendel Chemicals SRL, n.d. Ecuación (3-29)	2.34.E-02	kWh/celda	9.48.E-06	kWh/uf
5	Polvo de titanio	Entrada	Fabricación de celda	PTL	Capling, n.d.). Ecuación (3-29)	1.38.E+02	g/celda	5.61.E-02	g/uf
6	Energía sinterizado	Entrada	Fabricación de celda	PTL	Suposición y (Arnhold, n.d.). Ecuación (3-29)	3.46.E-01	kWh/celda	1.40.E-04	kWh/uf
7	Sellos de PPS	Entrada	Fabricación de celda		Suposición y (Moreno Soriano et al., 2021). Ecuación (3-29)	7.04.E+00	g/celda	2.85.E-03	g/uf
8	Acero inoxidable (Plato final)	Entrada	Integración stacks		Zhang et al., 2022. Ecuación (3-30)	2.31.E+01	kg/stack	3.12.E-05	kg/uf
9	Aleación acero baja	Entrada	Ensamble del sistema	BoP	(Barei, de la Rua, Mckl, & Hamacher, 2019. Tabla (3-23)	2.41.E+01	kg/BoP	1.08.E-06	kg/uf
10	Aleación acero alto	Entrada	Ensamble del sistema	BoP	(Barei, de la Rua, Mckl, & Hamacher, 2020. Tabla (3-23)	9.52.E+00	kg/BoP	4.29.E-07	kg/uf
11	Aluminio	Entrada	Ensamble del sistema	BoP	(Barei, de la Rua, Mckl, & Hamacher, 2020. Tabla (3-23)	5.01.E-01	kg/BoP	2.26.E-08	kg/uf
12	Cobre	Entrada	Ensamble del sistema	BoP	(Barei, de la Rua, Mckl, & Hamacher, 2020. Tabla (3-23)	5.01.E-01	kg/BoP	2.26.E-08	kg/uf
13	Plstico	Entrada	Ensamble del sistema	BoP	(Barei, de la Rua, Mckl, & Hamacher, 2020. Tabla (3-23)	1.50.E+00	kg/BoP	6.77.E-08	kg/uf

Item	Nombre	Tipo	Sección	Sub-sección	Referencia datos	Valor	Unid.	Por u.f.	Unid.
14	Material electrónico	Entrada	Ensamble del sistema	BoP	(Barei, de la Rua, Mckl, & Hamacher, 2020. Tabla (3-23))	5.51.E+00	kg/BoP	2.48.E-07	kg/uf
15	Lubricantes	Entrada	Ensamble del sistema	BoP	(Barei, de la Rua, Mckl, & Hamacher, 2020. Tabla (3-23))	1.00.E+00	kg/BoP	4.51.E-08	kg/uf
17	Energía eléctrica (renovable)	Entrada	Conversión (electrólisis)	Electrólisis	(María Villarreal Vives et al., 2023). Ecuación (3-31)	98%		5.40.E+01	kWh/uf
18	Energía eléctrica (de la red)	Entrada	Conversión (electrólisis)	Electrólisis	(María Villarreal Vives et al., 2023). Ecuación (3-31)	2%		1.15.E+00	kWh/uf
19	Agua enfriamiento	Entrada	Conversión (electrólisis)	Electrólisis	(María Villarreal Vives et al., 2023). Ecuación (3-32)	7.08.E+04	kg/h	3.91.E+00	kg/uf
20	Agua desionizada	Entrada	Conversión (electrólisis)	Electrólisis	(María Villarreal Vives et al., 2023). Ecuación (3-33)	1.62.E+03	kg/h	8.94.E+00	kg/uf
21	Energía compresión	Entrada	Compresión		minnuo. Ecuación (3-34)	3.70.E+02	kW	2.04.E+00	kWh/uf
22	Agua enfriamiento	Entrada	Compresión		Suposición.	2	m ³ /kgH ₂	2.00.E+01	kg/uf
23	Valvula DN50 (acero inoxidable o aleación aluminio)	Entrada	Compresión	Mantenimiento	Suposición y ecuación (3-35)	3.00.E+00	p/compresor	8.37.E-06	p/uf
24	Diafragma Viton o PTFE	Entrada	Compresión	Mantenimiento	Suposición y ecuación (3-35)	2.00.E+00	kg/Diafragma	5.58.E-06	kg/uf
25	Valvula DN 125	Salidas	Compresión	Mantenimiento	Suposicion	5.00.E+00	p/compresor	8.37.E-06	p/uf

Item	Nombre	Tipo	Sección	Sub-sección	Referencia datos	Valor	Unid.	Por u.f.	Unid.
26	Diafragma de PTFE	Salidas	Compresión	Mantenimiento	Suposicion			5.58.E-06	kg/uf

Tabla B6. Calidad de datos PEM

I	A	G	S	C	R	Ca	Back-ground	Comentarios back-ground	A	G	S	C	R	C	Calidad datos (ítem)
1	3	2	3	3	2	27	Platinum {GLO} market for platinum Cut-off, U	Este flujo representa platino refinado disponible en el mercado mundial. Es una opción adecuada si necesitas platino ya purificado, listo para aplicaciones industriales o de alta tecnología, como en celdas de combustible PEM	3	2	2	2	2	22	HIGH
2	3	2	3	3	2	27	Rhodium {GLO} market for rhodium Cut-off, U	Se ha seleccionado el flujo de <i>Rodio, mercado global (GLO)</i> como sustituto del iridio en el cátodo de la celda PEM, debido a la falta de inventario específico de iridio en la base de datos. Esta selección se basa en la similitud de propiedades entre el rodio y el iridio, ambos pertenecientes al grupo de metales del platino.	3	2	2	2	2	22	HIGH
3	3	2	3	3	2	27	Polypropylene, granulate {GLO} market for polypropylene, granulate Cut-off, U	Se ha seleccionado el flujo de Polipropileno granulado, mercado global (GLO) como un sustituto del Nafion en el contexto de la celda PEM debido a la falta de datos específicos sobre Nafion en la base de datos	3	2	1	1	1	15	MEDIUM
4	3	2	2	2	2	22	Electricity, medium voltage {ES} market for electricity, medium voltage Cut-off, U	El proceso de recubrimiento mediante el equipo de doble cara requiere un consumo eléctrico considerado de media. Mercado España a 2023.	3	3	3	3	3	30	HIGH
5	3	2	3	3	3	29	Titanium sponge {GLO} market for titanium sponge Cut-off, U	El titanio esponjoso es una opción válida para el Pore Transport Layer (PTL) en celdas de combustible PEM, dado su diseño poroso, resistencia a la corrosión y capacidad para mejorar la difusión de reactantes. Mercado hasta 2024.	3	2	3	2	2	25	HIGH
6	3	3	2	2	2	23	Electricity, medium voltage {ES} market for electricity, medium voltage Cut-off, U	, el consumo energético asociado al sinterizado del e clasifica como media debido a que las temperaturas requeridas y al tiempo de operación del horno, son considerables pero no	3	3	2	2	2	23	HIGH

I	A	G	S	C	R	Ca	Back-ground	Comentarios back-ground	A	G	S	C	R	C	Calidad datos (Ítem)
								extremos en comparación con otros procesos de fabricación industrial.							
7	3	3	2	2	2	23	Polyethylene, high density, granulate {GLO} market for polyethylene, high density, granulate Cut-off, U	Como alternativa, se ha optado por el polietileno de alta densidad (HDPE). A pesar de que el HDPE no posee la misma resistencia térmica que el PPS. Por eso además se selección HDPE virgen 100%. Inventario global a 2023.	3	2	2	2	2	22	HIGH
8	3	3	3	3	3	30	Steel, chromium steel 18/8 {GLO} market for steel, chromium steel 18/8 Cut-off, U	Chromium Steel 18/8 GLO" (AISI 304), Su alta resistencia a la corrosión es crucial para el funcionamiento a largo plazo de la celda de combustible, Mercado global hasta 2023.	3	2	2	2	2	22	HIGH
9	2	3	2	2	2	21	Steel, low-alloyed {GLO} market for steel, low-alloyed Cut-off, U	baja proporción de elementos adicionales como cromo, níquel, o molibdeno, Mercado global (GLO) hasta 2023.	3	2	2	2	2	22	HIGH
10	2	3	2	2	2	21	Steel, chromium steel 18/8 {GLO} market for steel, chromium steel 18/8 Cut-off, U	El mercado global de acero con cromo (acero aleado con cromo) usado en generación de energía (incluyendo aplicaciones de celdas PEM) producido principalmente en países como Sudáfrica, Kazajistán, India y Turquía, mercado hasta 2023.	3	2	2	2	2	22	HIGH
11	2	3	2	2	2	21	Aluminium, wrought alloy {GLO} market for aluminium, wrought alloy Cut-off, U	Representa una aleación de aluminio forjada (wrought alloy) y refleja el mercado promedio para este tipo de material, incluyendo etapas intermedias de transformación. Mercado global hasta 2023.	3	2	2	2	2	22	HIGH
12	2	3	2	2	2	21	Copper-rich materials {GLO} electrolyte, copper-rich to generic market for copper-rich materials Cut-off, U	s el tipo más común de cobre utilizado en aplicaciones eléctricas y electrónicas. Tiene una pureza de al menos 99.9%	3	2	2	2	2	22	HIGH
13	2	3	2	2	2	21	Polyethylene, high density, granulate, recycled {Europe without Switzerland} market for polyethylene, high density, granulate, recycled Cut-off, U	HDPE reciclado es una opción viable para elementos del BoP, Mercado Europa 2023.	3	2	2	2	2	22	HIGH
14	2	3	2	2	2	21	Electronic component, passive, unspecified {GLO} market for	Inventario global a 2023. Componentes que controlan el flujo de la electricidad de forma pasiva, como conductores o	3	2	2	2	2	22	HIGH

I	A	G	S	C	R	Ca	Back-ground	Comentarios back-ground	A	G	S	C	R	C	Calidad datos (Ítem)
							electronic component, passive, unspecified Cut-off, U	transformadores. Limitan el flujo de corriente. Cambian el voltaje de una señal eléctrica.							
15	2	3	2	2	2	21	Lubricating oil {RER} market for lubricating oil Cut-off, U	Aceite lubricante que proviene del mercado de la región de Europa (RER) 2023.	3	2	2	2	2	22	HIGH
17	3	2	3	3	2	27	Electricity, high voltage {CH} electricity, high voltage, wind power, import from Germany Cut-off, U	Inventario hasta 2022, modelado en Suiza.	3	2	2	2	2	22	HIGH
18	3	2	3	3	2	27	Electricity, medium voltage {ES} market for electricity, medium voltage Cut-off, U	Mercado español hasta 2022.	3	3	3	3	3	30	HIGH
19	3	2	3	3	2	27	Tap water {RER} market group for tap water Cut-off, U	Mercado Europeo hasta 2022.	3	2	2	2	2	22	HIGH
20	3	2	3	3	2	27	Water, deionised {Europe without Switzerland} market for water, deionised Cut-off, U	Mercado Europeo hasta 2022.	3	2	2	2	2	22	HIGH
21	3	3	1	1	1	16	Electricity, medium voltage {ES} market for electricity, medium voltage Cut-off, U	Mercado español hasta 2022.	3	3	3	3	3	30	HIGH
22	3	1	1	1	1	14	Tap water {RER} market group for tap water Cut-off, U	Mercado Europeo hasta 2022.	3	2	2	2	2	22	HIGH
23	3	1	1	1	1	14	Exhaust air valve, in-wall housing, plastic/steel, DN 125 {GLO} market for exhaust air valve, in-wall housing, plastic/steel, DN 125 Cut-off, U	Inventario para Europa hasta 2023	3	2	3	3	3	29	HIGH
24	3	1	1	1	1	14	Acrylonitrile-butadiene-styrene copolymer {GLO} market for acrylonitrile-butadiene-styrene copolymer Cut-off, U	Material sustituto para el viton. Mercado global hasta 2022.	3	1	1	1	1	14	MEDIUM

I	A	G	S	C	R	Ca	Back-ground	Comentarios back-ground	A	G	S	C	R	C	Calidad datos (ítem)
25	3	1	1	1	1	14	Used exhaust air valve in-wall housing, plastic/steel {CH} market for used exhaust air valve in-wall housing, plastic/steel Cut-off, U	Mercado hasta 2022 Suiza.	3	1	2	2	2	21	HIGH
26	3	1	1	1	1	14	Waste mass, total, placed in landfill	EI PTFE no tiene alto potencial de reciclaje. Se supone landfill.	3	1	1	1	1	14	MEDIUM