

Μαθηματική μοντελοποίηση αντίθετης διφασικής ροής σε υδατοδιαβρεκτά πορώδη υλικά για την παρασκευή στηριζόμενων καταλυτών Μολυβδαινίου και Νικελίου σε κυλινδρικά τεμαχίδια γ-αλουμίνας

Δ.Γ. Αβραάμ^{1,2,*}, Μ.Α. Γούλα¹

¹ΤΕΙ Δυτικής Μακεδονίας, Σχολή Τεχνολογικών Εφαρμογών, Τμήμα Μηχανικών Περιβάλλοντος και Μηχανικών Αντιρρύπανσης, Εργαστήριο Εναλλακτικών Καυσίμων και Περιβαλλοντικής Κατάλυσης (LAFEC), Κοίλα, 50100, Κοζάνη

²Περιφέρεια Κεντρικής Μακεδονίας, Περιφερειακή Ενότητα Ημαθίας, Τμήμα Περιβάλλοντος και Υδροοικονομίας, 59100, Βέροια

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Ο εμποτισμός πορώδων φορέων μεγάλης ειδικής επιφάνειας από υγρά διαλύματα ενεργών μετάλλων, στη μορφή μεταλλικών αλάτων ή συμπλόκων, αποτελεί μια σημαντική διεργασία για την παρασκευή των περισσοτέρων ετερογενών καταλυτών. Κατά τη διεργασία του *εμποτισμού*, ο φορέας έρχεται σε επαφή με το υδατικό διάλυμα του ενεργού ιόντος, το οποίο εισροφάται στον πορώδη χώρο του φορέα κάτω από την επίδραση των τριχοειδών δυνάμεων, ενώ το ενεργό συστατικό διαχέεται και προσροφάται στην επιφάνεια του φορέα. Το αποτέλεσμα είναι η διασπορά μικρών κρυσταλλιτών της πρόδρομης ένωσης στην επιφάνεια του φορέα, ενώ η μακροκατανομή του ενεργού συστατικού εξαρτάται από τις φυσικοχημικές παραμέτρους της διεργασίας και το σχετικό μέγεθος των ρυθμών εισρόφησης και διασποράς στον όγκο των πόρων, όπως και της ρόφησης/εκρόφησης στην πορώδη επιφάνεια του φορέα. Η εισρόφηση του διαλύματος εμποτισμού στο εσωτερικό του τεμαχιδίου σταματά όταν το διάλυμα εμποτισμού φτάσει στο κέντρο του τεμαχιδίου ή όταν οι τριχοειδείς δυνάμεις που είναι υπεύθυνες για την εισρόφηση του εμποτιστή εξισορροπούνται από την πίεση του εγκλωβισμένου αέρα.

Στην παρούσα εργασία πραγματοποιήθηκε μοντελοποίηση της διαδικασίας παρασκευής καταλυτών Μολυβδαινίου και Νικελίου με τη μέθοδο *ισορροπίας εναπόθεσης-διήθησης (EDF)* κυλινδρικών τεμαχιδίων γ-αλουμίνας. Για τον σκοπό αυτό, αναπτύχθηκε κατ' αρχήν ένα *πραγματικό ως προς τον μηχανισμό (true-to-mechanism)* μοντέλο της *αυθόρμητης εισρόφησης (spontaneous imbibition)* υγρού διαλύματος σε πορώδες υλικό, ως *αντίθετης ροής δύο φάσεων (countercurrent two-phase flow)* [4,5]. Στο μοντέλο αυτό ενσωματώθηκαν οι εξισώσεις *συναγωγής/διασποράς (advection/dispersion equation)* και *προσρόφησης (adsorption)* των πρόδρομων ιόντων της καταλυτικά ενεργής ουσίας στον πορώδη χώρο και την επιφάνεια της γ-αλουμίνας, αντίστοιχα.

Για τους καταλύτες Μολυβδαινίου ενσωματώθηκαν πειραματικά αποτελέσματα της κινητικής προσρόφησης ιόντων Μολυβδαινίου στην επιφάνεια της γ-αλουμίνας, προκειμένου να περιγραφεί ο ρυθμός ρόφησης/εκρόφησης [3], ενώ για τους καταλύτες Νικελίου χρησιμοποιήθηκε η ισόθερμος προσρόφησης Langmuir. Με την εφαρμογή του μοντέλου, επιτυγχάνεται να περιγραφεί τόσο η *μακροκατανομή της συγκέντρωσης του προσροφημένου ενεργού συστατικού* στο εσωτερικό των τεμαχιδίων, όσο και η *κατανομή του κορεσμού του υγρού διαλύματος και του εγκλωβισμένου αέρα* σε αυτό, ως συναρτήσεις του χώρου και του χρόνου. Συνεπώς το μοντέλο *επεκτείνει* το αρχικό μοντέλο των Lee και Aris [1], κατά το οποίο ο εγκλωβισμένος αέρας θεωρείται είτε ότι διαφεύγει εντελώς από το πορώδες μέσο είτε ότι εγκλωβίζεται ολοσχερώς στο κέντρο αυτού.

Με βάση τα παραπάνω αναπτύχθηκαν οι κατάλληλες εξισώσεις που προβλέπουν την εξέλιξη των φαινομένων του εμποτισμού και της προσρόφησης των πρόδρομων ιόντων της ενεργού φάσης στην εσωτερική επιφάνεια των πόρων της γ-αλουμίνας, ενώ μελετήθηκε η επίδραση του pH στην ακτινική βαθμίδα της συγκέντρωσης των ιόντων του Μολυβδαινίου (μακροκατανομή), καθώς και η επίδραση της συγκέντρωσης του διαλύματος εμποτισμού στην αντίστοιχη κατανομή της συγκέντρωσης των ιόντων του Νικελίου στην επιφάνεια των τεμαχιδίων.

Το μοντέλο επικυρώθηκε με την σύγκριση πειραματικών και θεωρητικών μακροκατανομών για τους καταλύτες Μολυβδαινίου σε γ-αλουμίνα, για τους οποίους υπάρχουν βιβλιογραφικά δεδομένα [2,3] ενώ εφαρμόστηκε και στους αντίστοιχους καταλύτες Νικελίου. Και στις δυο περιπτώσεις μελετήθηκε η μετάβαση της μακροκατανομής (ακτινική βαθμίδα συγκέντρωσης) του ενεργού καταλύτη από ομοιόμορφες (uniform) σε περιφερειακές (egg-shell) κατανομές με αντίστοιχη μεταβολή του pH

ή/και της συγκέντρωσης της πρόδρομης ένωσης στο διάλυμα εμποτισμού. Η σύγκριση πειραματικών και θεωρητικών αποτελεσμάτων ήταν άριστη, έτσι ώστε να ενθαρρύνεται η περαιτέρω ανάπτυξη του μοντέλου για τη μελέτη της παρασκευής και άλλων καταλυτών με εφαρμογή της μεθόδου Ισορροπίας Εναπόθεσης Διήθησης (EDF).

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] S.Y. Lee, R. Aris, Catal. Rev. Sci. Eng. 27 (1985) 207.
- [2] M.A. Goula, Ch. Kordulis, A. Lycourghiotis, J. of Catal. 133 (1992) 486.
- [3] N. Spanos, A. Lycourghiotis, J. of Catal. 147 (1994) 57.
- [4] D. Silin, T. Patzek, TiPM 54 (2004) 297.
- [5] Z. Tavassoli, R.W. Zimmerman, M.J. Blunt, TiPM 58 (2005) 173.

ΘΕΜΑΤΙΚΕΣ ΠΕΡΙΟΧΕΣ

Χημικές Διεργασίες/Κατάλυση/Ηλεκτροχημεία
Φαινόμενα Μεταφοράς