

## Συστηματική επιλογή μιγμάτων διαλυτών για διεργασίες χημικής απορρόφησης CO<sub>2</sub>

Θεόδωρος Ζαρογιάννης<sup>1,2</sup>, Αθανάσιος Ι. Παπαδόπουλος<sup>1</sup>, Πάνος Σεφερλής<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Εθνικό Κέντρο Έρευνας και Τεχνολογικής Ανάπτυξης, Ινστιτούτο Χημικών Διεργασιών και Ενεργειακών Πόρων, 57001, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα

<sup>2</sup>Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, 54124 Θεσσαλονίκη, Ελλάδα

Οι διεργασίες χημικής απορρόφησης με χρήση διαλυτών αποτελούν την πιο διαδεδομένη και εμπορικά αξιοποιήσιμη τεχνολογία δέσμευσης CO<sub>2</sub> παγκοσμίως. Ανάμεσα στις επιθυμητές ιδιότητες των διαλυτών ώστε η τεχνολογία να είναι οικονομικά και περιβαλλοντικά βιώσιμη περιλαμβάνονται η γρήγορη κινητική της αντίδρασής τους με CO<sub>2</sub> ώστε να χρησιμοποιούνται συστήματα μικρού μεγέθους, η χαμηλή ενέργεια για την θερμική αναγέννησή τους, το χαμηλό ιξώδες ώστε να ευνοούνται τα φαινόμενα μεταφοράς μάζας κλπ. Παρά το γεγονός ότι οι χρησιμοποιούμενοι διαλύτες είναι κυρίως ένυδρα διαλύματα καθαρών αμινών, τα τελευταία χρόνια παρατηρείται μια σημαντική τάση αντικατάστασής τους από ένυδρα δυαδικά μίγματα αμινών. Με αυτόν τον τρόπο αντιμετωπίζονται οι ανεπάρκειες των καθαρών αμινών, οι οποίες συχνά παρουσιάζουν ευνοϊκή συμπεριφορά σε κάποιες ιδιότητες εις βάρος πολλών άλλων στις οποίες επιφέρουν ανεπιθύμητα αποτελέσματα. Η επιλογή του βέλτιστου μίγματος ως προς τη σύσταση (χημικά χαρακτηριστικά μορίων) και τη συγκέντρωση (ποσοστό ενός συστατικού στο άλλο) αποτελεί πρόκληση λόγω α) του μη ιδανικού χαρακτήρα του μίγματος αμινών-νερού και διοξειδίου του άνθρακα β) του πλήθους των συνδυασμών των μορίων ως πιθανών συστατικών του μίγματος και γ) της ανάγκης συνεκτίμησης πολλών ιδιοτήτων ως κριτήρια επιλογής του μίγματος με τις επιθυμητές ιδιότητες. Η συστηματική χρήση κατάλληλων υπολογιστικών εργαλείων μοριακού σχεδιασμού (Computer-aided Molecular Design- CAMD) και πρόβλεψης ιδιοτήτων μπορεί να βοηθήσει στην αντιμετώπιση αυτών των προκλήσεων, ωστόσο οι εφαρμογές τους ακόμα και σε ένυδρα διαλύματα καθαρών αμινών είναι εξαιρετικά περιορισμένες.

Σ' αυτή την εργασία προτείνεται μια συστηματική προσέγγιση για τον προκαταρκτικό προσδιορισμό κατάλληλων δυαδικών μιγμάτων αμινών ως υποψηφίων διαλυτών για δέσμευση CO<sub>2</sub> θεωρώντας αρκετές σημαντικές ιδιότητες σαν κριτήρια επιλογής. Η παρούσα προσέγγιση βασίζεται σε μεθόδους CAMD και αποτελείται από μια σειρά σταδίων λήψης αποφάσεων που συνεκτιμούν επιδράσεις μεταξύ διαλυτών, διαλυτών με CO<sub>2</sub>, και διαλυτών με νερό χρησιμοποιώντας και συνδυάζοντας μοντέλα συνεισφοράς λειτουργικών ομάδων, καταστατικές εξισώσεις και μοντέλα συντελεστή ενεργότητας προκειμένου να αντιμετωπιστεί ο μη ιδανικός χαρακτήρας που παρουσιάζει η υγρή και η αέρια φάση σε ορισμένες ιδιότητες. Σκοπός της παρούσας προσέγγισης είναι ο γρήγορος εντοπισμός αποτελεσματικών ως προς την δέσμευση CO<sub>2</sub> συνδυασμών αμινών, οι οποίες μπορούν στη συνέχεια να αξιολογηθούν χρησιμοποιώντας διεξοδικά μοντέλα πρόβλεψης ή πειράματα. Μια πολυκριτηριακή μεθοδολογία επιλογής εφαρμόζεται για να αξιολογηθούν μίγματα που επιτρέπουν την αντιστάθμιση υψηλών και χαμηλών επιδόσεων στις πολλαπλές ιδιότητες που χρησιμοποιούνται ως κριτήρια επιλογής, αποφεύγοντας μίγματα που είναι ακατάλληλα για δέσμευση CO<sub>2</sub>. Η προτεινόμενη μέθοδος εφαρμόζεται σε μίγματα που προκύπτουν από πολυάριθμους δυαδικούς συνδυασμούς των αμινών που έχουν προηγουμένως διερευνηθεί σε καθαρή υδατική μορφή ως διαλύτες δέσμευσης CO<sub>2</sub>.