



ΙΤΕ / ΕΙΧΗΜΥΘ

ΣΕΜΙΝΑΡΙΟ Μ.Υ. ΣΕΜΙΝΑΡΙΟ Μ.Υ.

ΟΜΙΛΗΤΗΣ: κ. Παναγιώτης Κροκιδάς

Υπεύθυνος Διατριβής: Dr. Βασίλης Μπουργανός

ΘΕΜΑ: Υπολογιστική προσομοίωση φαινομένων μεταφοράς και της επίδρασης της θερμοκρασίας σε ζεολιθικές μεμβράνες
Computational simulation of transport phenomena and temperature effects on zeolite membranes

ΤΟΠΟΣ: Αίθουσα Σεμιναρίων ΙΤΕ/ΕΙΧΗΜΥΘ

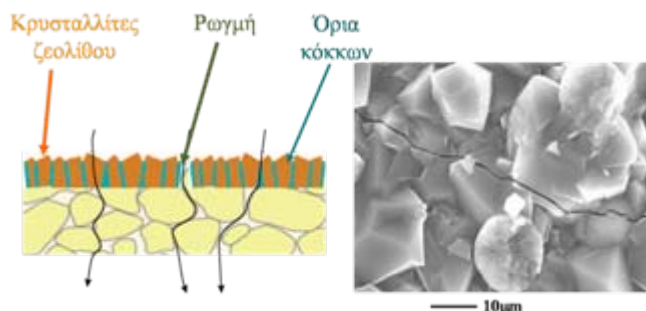
ΗΜΕΡΟΜΗΝΙΑ: Τετάρτη, 18 Νοεμβρίου 2009

ΩΡΑ: 12:00

ΠΕΡΙΛΗΨΗ:

Η δυνατότητα των μικροπορωδών στερεών να απορροφούν μεγάλες ποσότητες αερίων αξιοποιείται στη βιομηχανία σε διαχωρισμούς μεγάλης κλίμακας αλλά και σε διεργασίες καθαρισμού. Ένα μεγάλο κομμάτι τέτοιων διεργασιών στηρίζεται στον ταχέως αναπτυσσόμενο κλάδο των ναυοπορωδών υλικών, με έμφαση στα λεγόμενα μοριακά κόσκινα, τα οποία διαχωρίζουν ουσίες με βάση το μοριακό τους μέγεθος. Μια μεγάλη οικογένεια τέτοιων υλικών είναι αυτή των ζεολιθών, με πλήθος εφαρμογών σε διαχωρισμούς αερίων, στην κατάλυση και τη βιομηχανία πετρελαίου, καθώς και στην αποθήκευση αερίων με σημαντικότερη αυτή του υδρογόνου.

Η συνήθης φυσική διεργασία διαχωρισμού αερίων, στην οποία χρησιμοποιούνται οι ζεόλιθοι, ονομάζεται Pressure Swing Adsorption (PSA). Στη διεργασία αυτή οι ζεόλιθοι έχουν συνήθως τη μορφή πελλέτας. Τα τελευταία χρόνια γίνονται πολλές προσπάθειες για τη σύνθεση μεμβρανών από ζεόλιθους, καθώς η χρήση διάταξης μεμβρανών αντί PSA προσφέρει πολλά πλεονεκτήματα. Μια τυπική διάταξη ζεολιθικής μεμβράνης πάνω σε υπόστρωμα φαίνεται στο ακόλουθο σχήμα.





ΙΤΕ / ΕΙΧΗΜΥΘ

ΣΕΜΙΝΑΡΙΟ Μ.Υ. ΣΕΜΙΝΑΡΙΟ Μ.Υ.

Μεταβολές της θερμοκρασίας προκαλούν όχι μόνο μεταβολές στον όγκο του υλικού αλλά και ανεπιθύμητες παραμορφώσεις ή και ρωγμές, λόγω του διαφορετικού συντελεστή θερμικής διαστολής του υποστρώματος. Εφόσον μια τέτοια μεμβράνη πρόκειται να χρησιμοποιηθεί σε μεγάλο θερμοκρασιακό εύρος, είναι απαραίτητο να γνωρίζει κανείς πώς μεταβάλλεται η δομή της κατά την ψύξη ή τη θέρμανση, καθώς και τους μηχανισμούς που κρύβονται πίσω από τέτοιες μεταβολές. Το πρόβλημα γίνεται πιο σύνθετο όταν πρόκειται για υλικό το οποίο εμφανίζει αρνητικό συντελεστή θερμικής διαστολής, φαινόμενο το οποίο έχει παρατηρηθεί πειραματικά αλλά και διαπιστωθεί θεωρητικά σε περιπτώσεις όπως αυτές των ζεολίθων LTA, NaX και DAY και λαμβάνει χώρα σε μεγάλο θερμοκρασιακό εύρος.

Η παρουσίαση εστιάζεται στον φωγιασίτη (NaX και DAY). Αρχικώς, μοντελοποιήθηκαν στον υπολογιστή διεργασίες όπως ρόφηση και διάχυση μικρών μορίων μέσα στον ζεόλιθο και έγινε σύγκριση με πειραματικά δεδομένα, αναδεικνύοντας πολύ καλή συμφωνία. Απώτερος στόχος μας είναι η κατανόηση του μηχανισμού που κρύβεται πίσω από την μη συμβατική απόκριση του υλικού με τις μεταβολές της θερμοκρασίας, καθώς επίσης η επίδραση της θερμοκρασίας στην ροφητική του ικανότητα και στις μηχανικές του ιδιότητες. Γί αυτό το λόγο αναπτύχθηκαν δύο τεχνικές, οι οποίες προσομοιώνουν την επίδραση της θερμοκρασίας στις θέσεις των ατόμων και το συνολικό όγκο του συστήματος, κάνοντας πρακτικά μιαν εκ νέου ανακατασκευή του υλικού στον υπολογιστή. Επίσης, έγιναν πειράματα XRD, τα φάσματα των οποίων χρησιμοποιήσαμε για να υπολογίσουμε τον όγκο του φωγιασίτη σε υψηλές θερμοκρασίες, συμπληρώνοντας έτσι τα απαραίτητα πειραματικά δεδομένα της βιβλιογραφίας.

Η σύγκριση θεωρητικών και πειραματικών αποτελεσμάτων είναι απόλυτα ικανοποιητική και υποδηλώνει μια σαφή εξάρτηση του πρόσημου του συντελεστή θερμικής διαστολής τόσο από την θερμοκρασία, όσο και από την παρουσία ατόμων Al που έχουν αντικαταστήσει άτομα Si στο πλέγμα.