

## Αξιοποίηση CO<sub>2</sub> στην καταλυτική διεργασία οξειδωτικής αφυδρογόνωσης του αιθανίου προς αιθυλένιο: Μελέτη μηχανισμού και κινητικής

**M. Τασιούλα<sup>1</sup>, Σ.Α. Θεοφανίδης<sup>2</sup>, Α. Λεμονίδου<sup>1,3,\*</sup>**

<sup>1</sup>Τμήμα Χημικών Μηχανικών, ΑΠΘ, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα

<sup>2</sup>AristEng S.à r.l., 77, Rue de Merl, L-2146, Λουξεμβούργο, Λουξεμβούργο

<sup>3</sup>Εθνικό Κέντρο Έρευνας & Τεχνολογικής Ανάπτυξης, Θέρμη, Ελλάδα

(\*[alemonidou@cheng.auth.gr](mailto:alemonidou@cheng.auth.gr))

### ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Το αιθυλένιο αποτελεί ένα από τα σημαντικότερα προϊόντα της πετροχημικής βιομηχανίας, καθώς χρησιμοποιείται ως πρώτη ύλη για την παραγωγή προϊόντων προστιθέμενης αξίας, όπως χημικά, πολυμερή πλαστικά κ.ά. Η παγκόσμια ζήτηση σε αιθυλένιο αυξάνεται συνεχώς, φτάνοντας τους 170 εκατομμύρια τόνους το 2019 <sup>[1]</sup>. Σήμερα, το μεγαλύτερο μέρος της παραγωγής του αιθυλενίου πραγματοποιείται μέσω της ενεργοβόρας ατμοπυρόλυσης της νάφθας και του αιθανίου. Μία πολλά υποσχόμενη εναλλακτική διεργασία είναι η οξειδωτική αφυδρογόνωση του αιθανίου, με παράλληλη αξιοποίηση του διοξειδίου του άνθρακα, CO<sub>2</sub> (CO<sub>2</sub>-EDH). Η αξιοποίηση του CO<sub>2</sub> συμβαδίζει με τις επιταγές της πράσινης συμφωνίας μεταξύ των Ευρωπαϊκών κρατών, η οποία αποσκοπεί στην μετατροπή της Ευρώπης στην πρώτη κλιματικά ουδέτερη ήπειρο έως το 2050, μέσω του εκμηδενισμού των εκπομπών των αερίων του θερμοκηπίου, των οποίων κύριο συστατικό αποτελεί το διοξείδιο του άνθρακα. Για την μελέτη της παραπάνω διεργασίας, συντέθηκαν υλικά με βάση το σίδηρο, 5wt% Fe oxide-based catalyst, σε υπόστρωμα μεικτών οξειδίων (NiO-MgO-ZrO<sub>2</sub>). Η σύνθεση του καταλύτη πραγματοποιήθηκε σε δύο στάδια: α) σύνθεση του υποστρώματος με την μέθοδο αυτανάφλεξης λύματος – πηκτής και β) σύνθεση του καταλύτη με την μέθοδο του υγρού εμποτισμού. Ο βέλτιστος καταλύτης σιδήρου, επονομαζόμενος ως Fe-700(5h), παρουσίασε υψηλή εκλεκτικότητα προς αιθυλένιο ~90%, σε μετατροπή αιθανίου >20%, στους 650°C <sup>[2]</sup>. Στην παρούσα εργασία μελετάται ο μηχανισμός και η κινητική της CO<sub>2</sub>-EDH. Για τον σκοπό αυτό πραγματοποιήθηκαν κινητικά πειράματα σε μεγάλο εύρος συνθηκών και μια σειρά πειραμάτων με τροφοδοσία αιθανίου και ισοτοπικού C<sup>18</sup>O<sub>2</sub> στον βέλτιστο καταλύτη Fe-700(5h). Υπάρχουν δύο προτεινόμενοι μηχανισμοί για την CO<sub>2</sub>-EDH: 1) Ένας άμεσος μηχανισμός αναγωγής, όπου το πλεγματικό οξυγόνο του καταλύτη συμμετέχει στην αντίδραση, παράγοντας C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> και H<sub>2</sub>O. Έπειτα, το διοξείδιο του άνθρακα αναπληρώνει το πλεγματικό οξυγόνο και ανάγεται σε CO. 2) Ένας έμμεσος μηχανισμός, όπου ο καταλύτης παρουσιάζει ικανότητα αφυδρογόνωσης του αιθανίου, παράγοντας C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> και H<sub>2</sub>, με το παραγόμενο H<sub>2</sub> να αντιδρά στη συνέχεια με το CO<sub>2</sub> μέσω της αντίστροφης αντίδρασης μετάθεσης νερού. Με βάση τα αποτελέσματα των πειραμάτων που διεξήχθησαν φαίνεται πως ο έμμεσος μηχανισμός υπερισχύει κατά την CO<sub>2</sub>-EDH, χρησιμοποιώντας τον συγκεκριμένο καταλύτη οξειδίου του σιδήρου, σε θερμοκρασίες 600-650°C. Η επιλογή του κατάλληλου εγγενούς κινητικού μοντέλου με βάση τον μηχανισμό είναι σε εξέλιξη.

**ΛΕΞΕΙΣ ΚΛΕΙΔΙΑ:** Αξιοποίηση CO<sub>2</sub>, Παραγωγή Αιθυλενίου, Οξειδωτική Αφυδρογόνωση, Αιθάνιο, Μελέτη μηχανισμού.

### ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] Cui Y, Jiang Y, Xiao M, Munir M Z, Riaz S, Rasul F, Daroch M. (2022). *Int. J. Sci.*, 23.
- [2] Tasioula M, de Clermont Gallerande E, Theofanidis S A, Longo A, Lomachenko K A, Sahle C, Lemonidou A A. (2023). *ACS Catal*, 13, 2179-2189.