

## ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΔΙΕΡΓΑΣΙΑΣ ΗΛΕΚΤΡΟΧΗΜΙΚΗΣ ΑΝΑΓΩΓΗΣ CO<sub>2</sub> ΔΕΣΜΕΥΜΕΝΟΥ ΣΕ ΔΙΑΛΥΤΕΣ ΓΙΑ ΠΑΡΑΓΩΓΗ ΧΡΗΣΙΜΩΝ ΠΡΟΪΟΝΤΩΝ

Α.-Σ. Κυριακίδης<sup>1,\*</sup>, Γ. Γκίζας<sup>1</sup>, Π. Καζεπίδης<sup>1,2</sup>, Π. Σεφερλής<sup>2</sup>, Α.Ι. Παπαδόπουλος<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Εθνικό Κέντρο Έρευνας & Τεχνολογικής Ανάπτυξης, Θέρμη, Ελλάδα

<sup>2</sup>Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, ΑΠΘ, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα

(\* [alexkyr@certh.gr](mailto:alexkyr@certh.gr))

### ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η δέσμευση CO<sub>2</sub> με χρήση διαλυτών είναι μια ευρέως διαδεδομένη τεχνολογία που εφαρμόζεται και σε βιομηχανική κλίμακα. Το κύριο μειονέκτημα είναι το υψηλό κόστος δέσμευσης που οφείλεται κυρίως στις απαιτήσεις θερμικής αναγέννησης των διαλυτών. Η ηλεκτροχημική αναγωγή του CO<sub>2</sub> μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την παραγωγή πολύτιμων προϊόντων, όπως η μεθανόλη, το αιθυλένιο, κλπ., μέσω της καταλυτικής αντίδρασης του CO<sub>2</sub> με το H<sub>2</sub>. Το κύριο μειονέκτημα αυτής της διεργασίας είναι ότι η χαμηλή διαλυτότητα του CO<sub>2</sub> στο νερό έχει ως αποτέλεσμα χαμηλούς ρυθμούς παραγωγής και μετατροπής. Τα τελευταία χρόνια, η προοπτική της απευθείας αξιοποίησης των διαλυτών δέσμευσης της διεργασία απορρόφησης στη διεργασία ηλεκτροχημικής αναγωγής και άρα η χρήση του διαλύτη ως μέσο δέσμευσης, μεταφοράς αλλά και ως ηλεκτρολύτη στη διεργασία ηλεκτρόλυσης, έχει εξεταστεί πειραματικά. Αυτή η προσέγγιση, όπου το CO<sub>2</sub> απελευθερώνεται και αντιδρά με το H<sub>2</sub> ενώ ταυτόχρονα ο διαλύτης αναγεννάται και επαναχρησιμοποιείται στη διεργασία απορρόφησης, επιτρέπει την παροχή ενός ρεύματος με μεγαλύτερη συγκέντρωση CO<sub>2</sub> και την πλήρη αντικατάσταση της ενεργοβόρας θερμικής διεργασίας αναγέννησης των διαλυτών. Ωστόσο, παρά την μεγάλη προοπτική αυτής της προσέγγισης, οι υπάρχουσες μελέτες είναι πειραματικές, ενώ οι θεωρητικές μελέτες που βασίζονται σε μαθηματικά μοντέλα χρησιμοποιούν κυρίως υδατικά διαλύματα CO<sub>2</sub> (με πρόσθετα π.χ. KHCO<sub>3</sub>) για αύξηση της απόδοσης. Επίσης, η χρήση αμινών δεν έχει ληφθεί υπόψη σε θεωρητικές μελέτες αξιολόγησης τέτοιων συστημάτων, οπότε η περαιτέρω μελέτη τους κρίνεται απαραίτητη.

Στην παρούσα εργασία αναπτύσσεται ένα μαθηματικό μοντέλο για την ηλεκτροχημική αναγωγή του CO<sub>2</sub> σε προϊόντα προστιθέμενης αξίας, χρησιμοποιώντας μίγματα δεσμευμένου CO<sub>2</sub> με βάση αμίνες. Το μαθηματικό μοντέλο αποτελείται από ισοζύγια μάζας (Nernst-Planck), ισοζύγια ηλεκτρικού φορτίου και ρεύματος, διάχυση πρωτονίων μέσω της μεμβράνης και αντιδράσεις στην κάθοδο και άνοδο (Butler-Volmer). Στη συνέχεια, η διεργασία αξιολογείται για δύο διαφορετικές αμίνες (MEA και MCA), και συγκρίνεται με την περίπτωση του όξινου ανθρακικού κάλιου (KHCO<sub>3</sub>). Οι βασικοί δείκτες απόδοσης περιλαμβάνουν, μεταξύ άλλων, τη απόδοση Faraday, τη μετατροπή του CO<sub>2</sub> και το ρυθμό παραγωγής. Τα αποτελέσματα καταδεικνύουν τη βιωσιμότητα της διαδικασίας λόγω αυξημένης απελευθέρωσης και αναγωγής του δεσμευμένου CO<sub>2</sub> στο ηλεκτροχημικό στοιχείο σε σχετικά χαμηλή θερμοκρασία. Το μοντέλο μπορεί στη συνέχεια να χρησιμοποιηθεί στην περαιτέρω μελέτη βελτιστοποίησης για διαγράμματα ροής για τη δέσμευση και αξιοποίηση CO<sub>2</sub>.

**ΛΕΞΕΙΣ ΚΛΕΙΔΙΑ:** Αξιοποίηση CO<sub>2</sub>, Ηλεκτροχημική αναγωγή CO<sub>2</sub>, δέσμευση CO<sub>2</sub> με αμίνες