



SIMULACIÓ DE MOLÈCULES

Enric Valiente Ciutat

Responsable :



LINIALS DINS DE ZEOLITES

Laboratori Investigació

Flor Siperstein

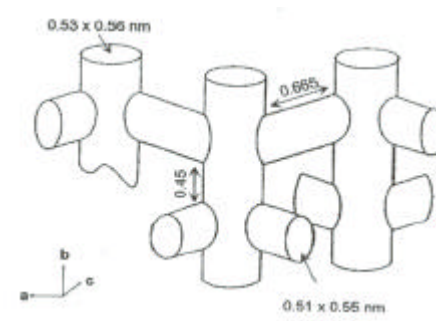
Introducció

- Actualment l'adsorció és una de les operacions unitàries més importants a l'indústria.
- Esdevé quan una superfície d'un sòlid és exposat a un gas o un líquid
- Dessecants, llits catalitzats, separació de gasos, purificació de líquids, control de la pol·lució... Són algunes de les aplicacions dels adsorbents.
- Ho definim com l'enriquiment d'un material o increment de la densitat del fluid en les immediacions de la interfície
- Les Zeolites són Aluminosilcats cristal·lins amb fórmula

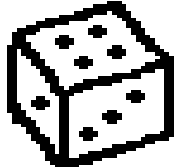


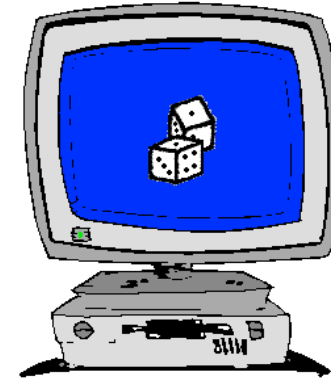
Objectius

- Estudiar el comportament de molècules lineals, amb diferents distribucions de càrregues, dins les estructures de zeolites utilitzades en processos industrials
- Desenvolupament de models que puguin descriure el complex comportament de mescles adsorbides en aquests materials
- Determinar la capacitat de certes zeolites, en concret **Silicalite**, per ser utilitzades en separació de gasos
- Determinar els millors models per descriure els resultats obtinguts

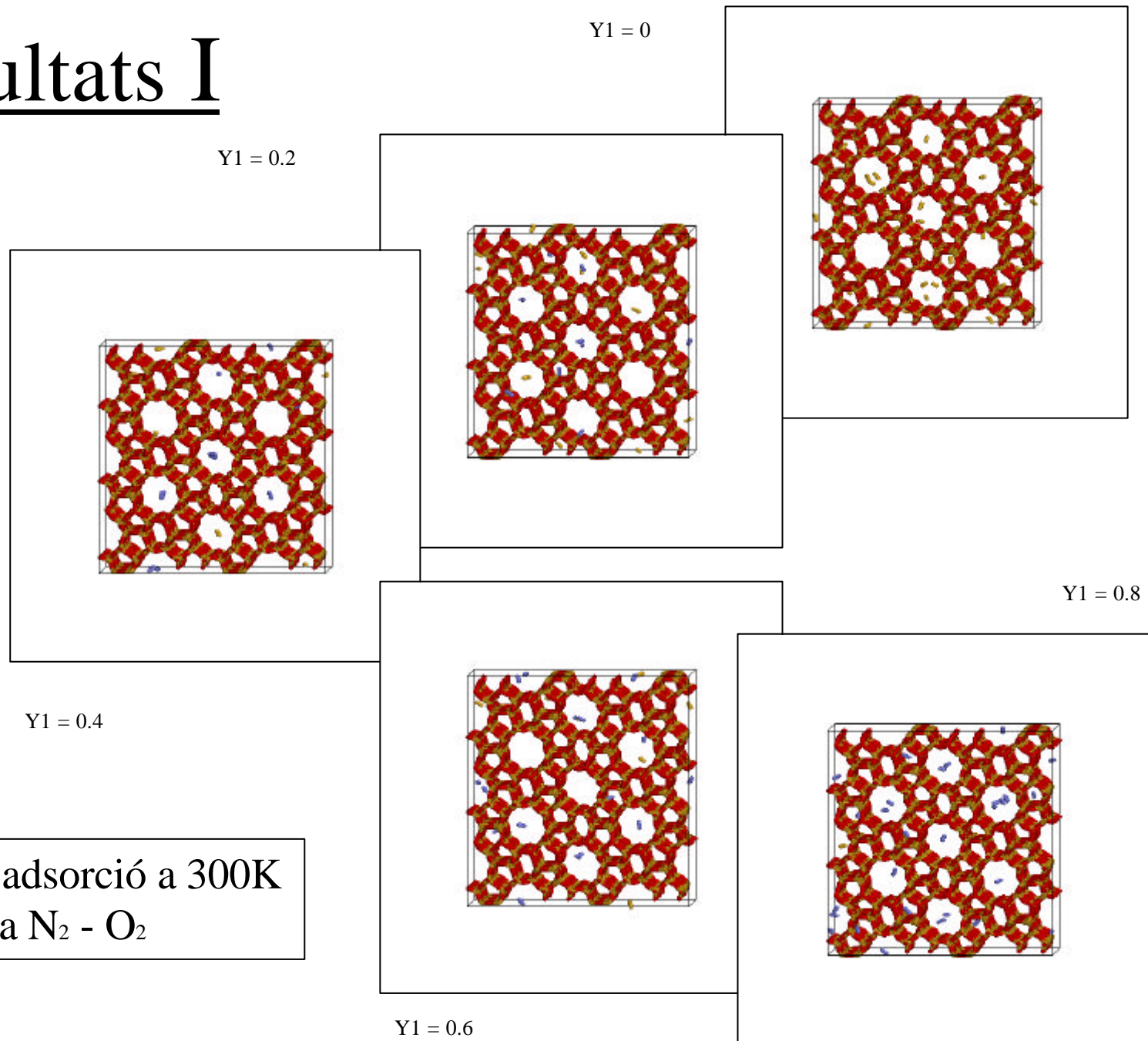


Monte Carlo Simulació

- Diversos procediments informatics desenvolupats durant els últims anys estan basats en la mecànica estadística de fluids confinats
- Una manera de resoldre aquestes equacions és mitjançant el procediment numèric anomenat Simulació Molecular, del que Monte Carlo n'és un exemple concret.
- Un generador de nombres és utilitzat per a fer rotar i moure les molècules també a  l'atzar.

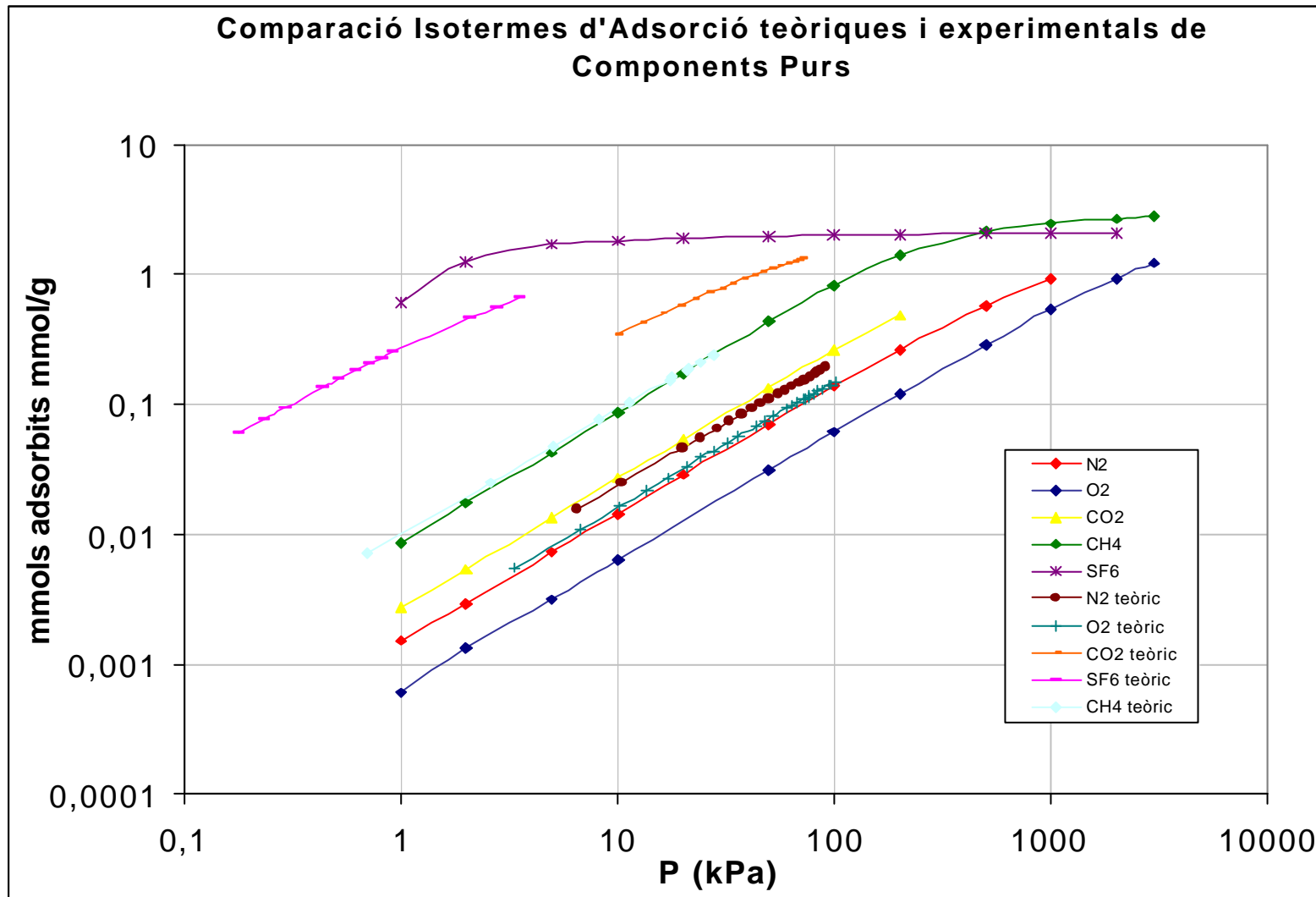


Resultats I

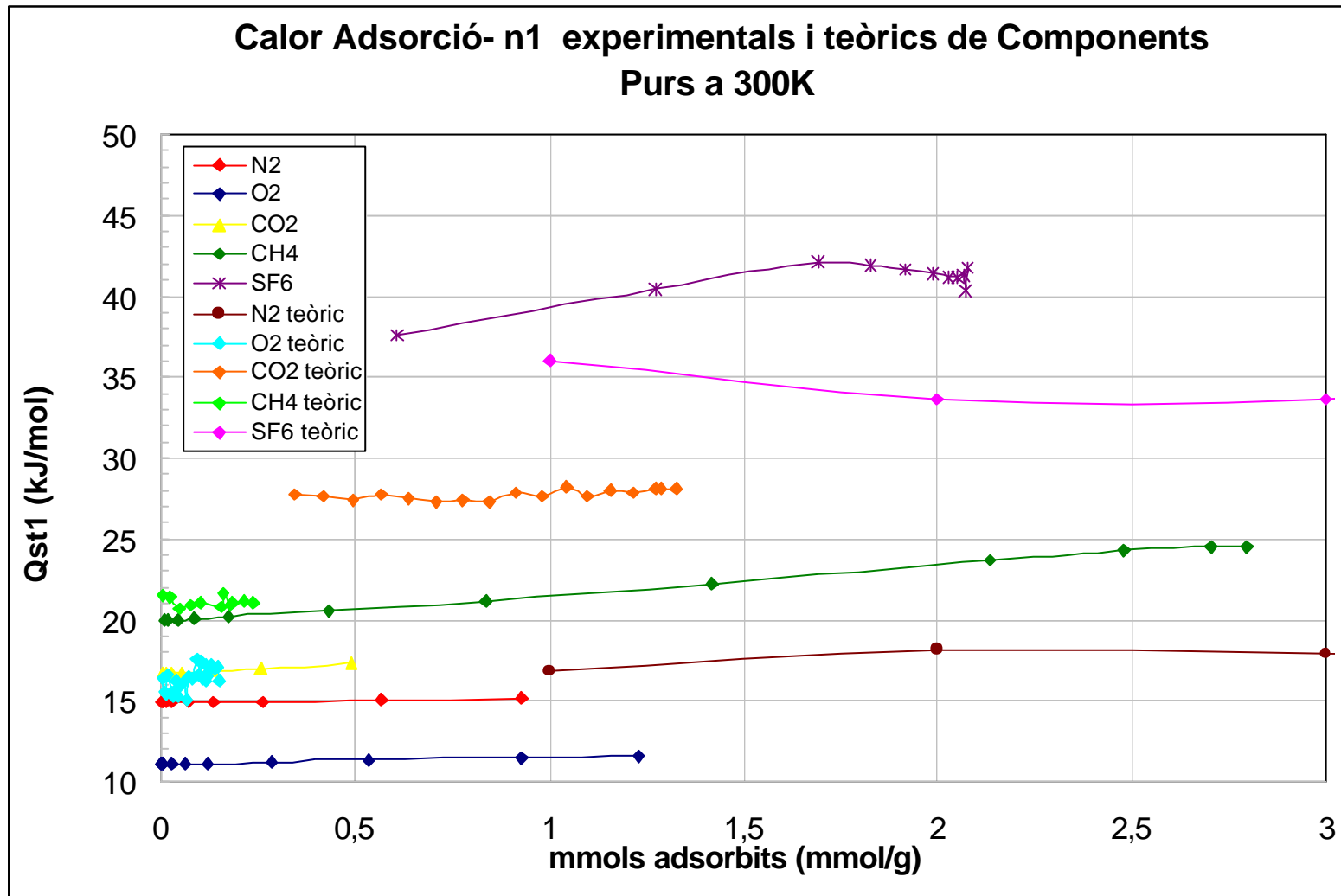


Isoterma d'adsorció a 300K
de la mescla $N_2 - O_2$

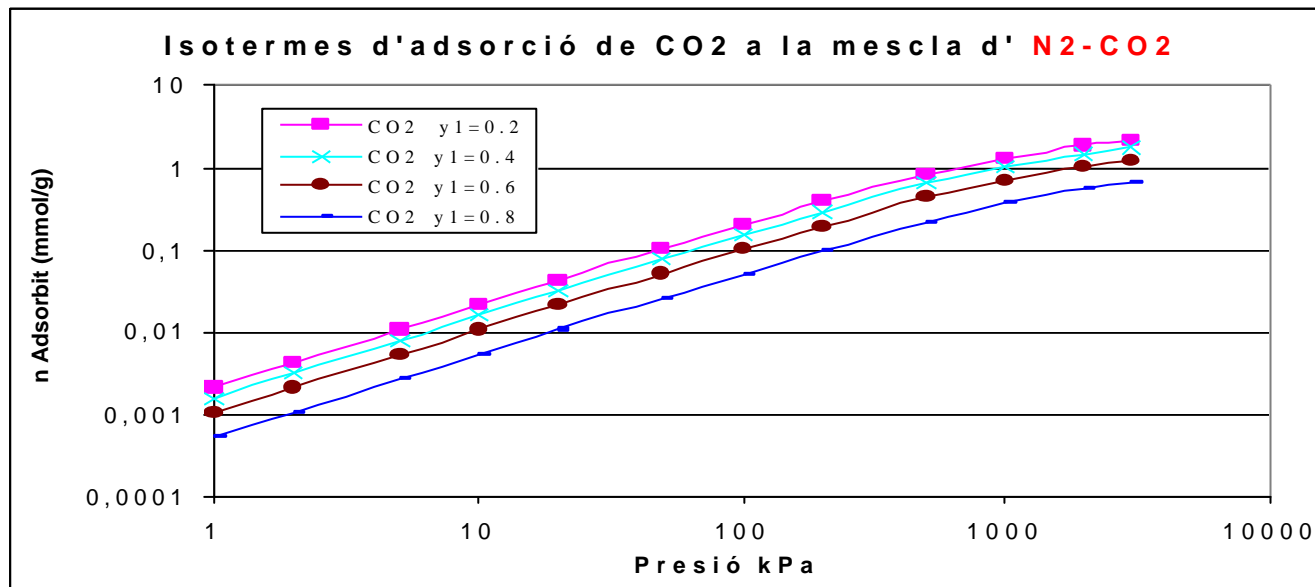
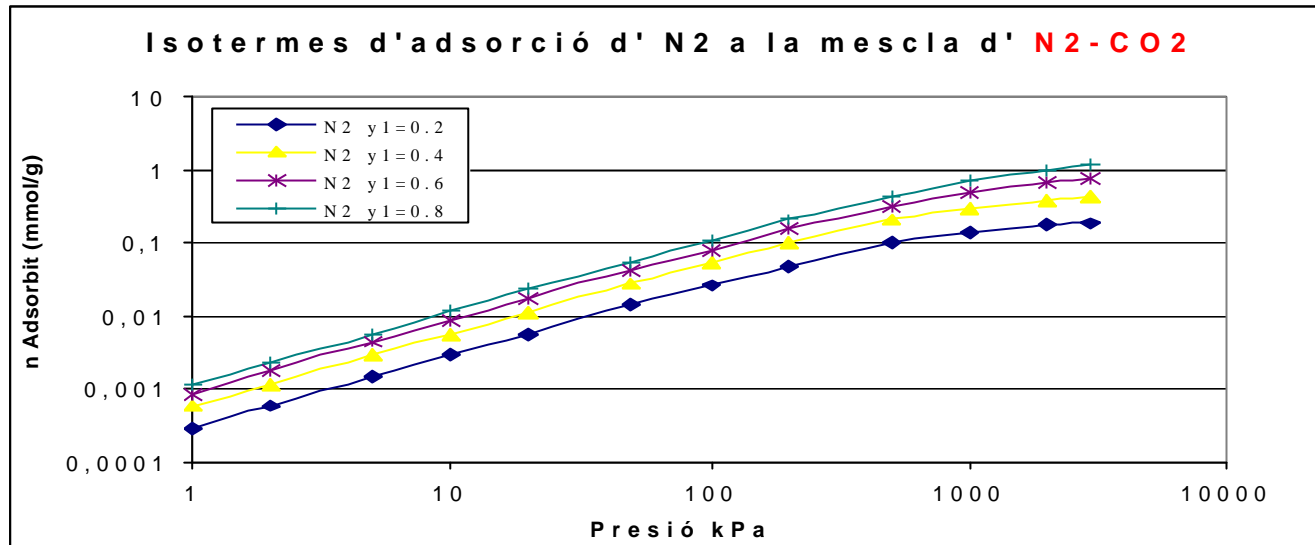
Resultats II



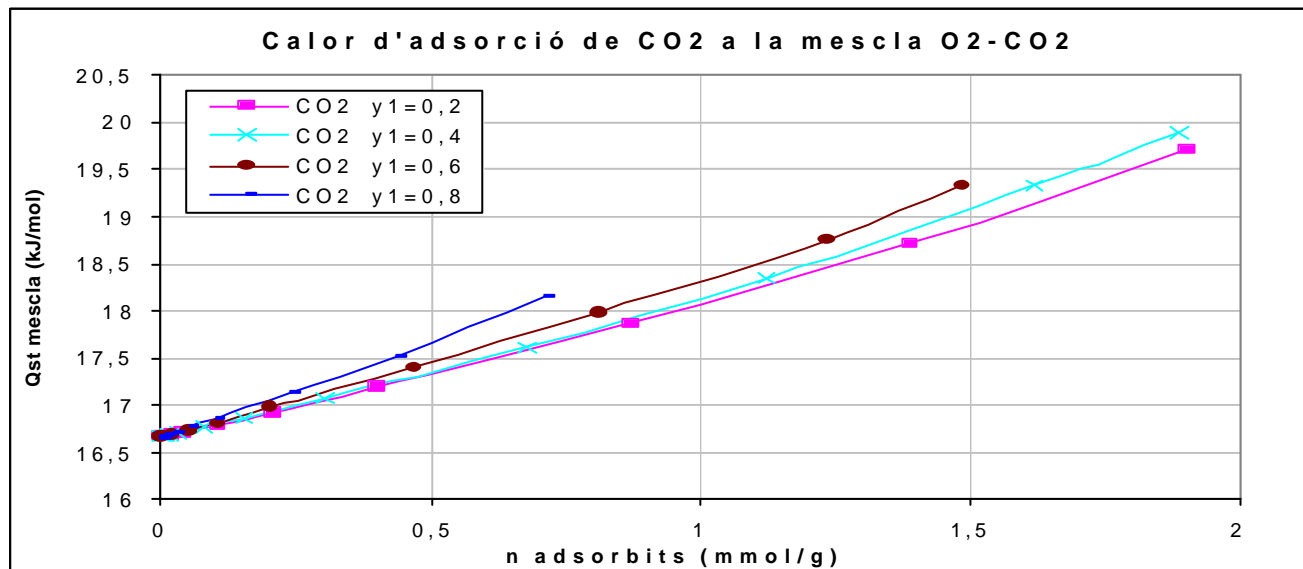
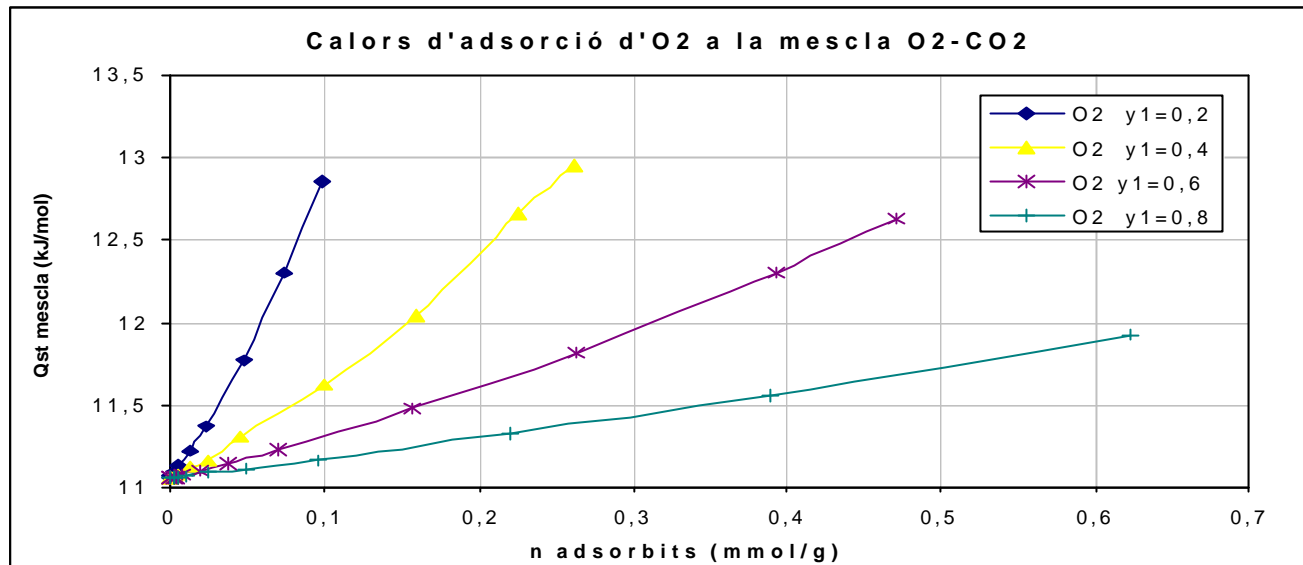
Resultats III



Resultats IV



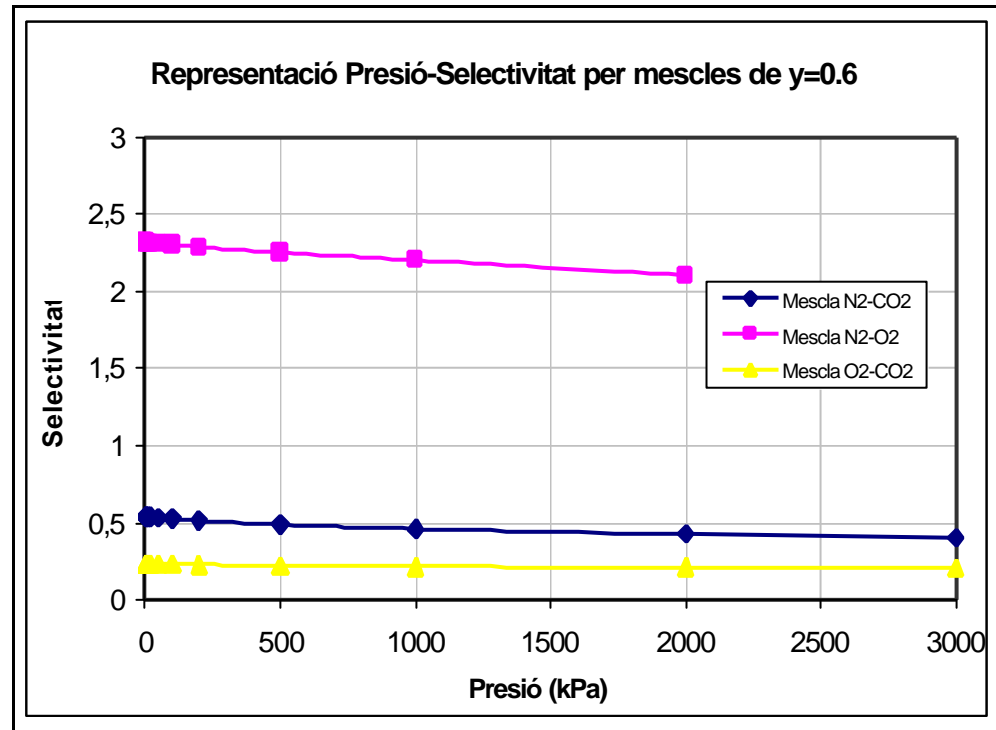
Resultats V



Selectivitat

$$S ? \frac{x_1 / y_1}{x_2 / y_2} ? \frac{n_1 / y_1}{n_2 / y_2}$$

- És un terme molt important per tal d'escollir un bon sorbent per al sistema.
- És el primer pas en el desenvolupament de processos de separació per adsorció
- Depèn de cada cinètica o equilibri d'adsorció



Conclusions

- Els resultats de components purs obtinguts de manera experimental disten bastant dels teòrics
- El programa de Simulació sí reproduïx les tendències dels resultats de manera correcta per aquest compostos.
- Per a pressions de treball altes no disposem de dades teòriques, però s'intueix la mateixa dinàmica de resultats.
- Els resultats són coherents en cas de variació de temperatura.
- Per a les mescles no disposem de dades teòriques però la tendència dels resultats també és correcta
- La Selectivitat és independent de la composició i la pressió de treball (assumim la teoria de Langmuir).