

H21

非理想吸着溶液モデルによる二溶質系吸着平衡の推算

(宇部高専) 内海薫・田中勇弥・(正) 福地賢治

1. 緒言

吸着装置の最適設計の基礎として吸着平衡関係が不可欠となる。とくに、排水の高度処理や超純水の製造に活性炭が有用なものとなる。そこで本研究では、吸着剤としてフェノール樹脂から作られた活性炭ペルファインを用いて、得られた単溶質、二溶質水溶液系の吸着平衡データを、非理想吸着溶液 (NIAS) モデルへ適用することを試みた。

2. 相関および推算²⁾

得られた吸着データを非理想吸着溶液 (NIAS) モデルに適用した。

$$c_{i,0} = \frac{n_{i,0}^m}{H_{i(w)}} \frac{\theta}{1-\theta} \left[A_{iw} \frac{1-(1-A_{wi})\theta}{A_{iw}+(1-A_{iw})\theta} \right] \times \exp \left[-\frac{A_{wi}(1-A_{wi})\theta}{1-(1-A_{wi})\theta} \frac{(1-A_{iw})\theta}{A_{iw}+(1-A_{iw})\theta} \right] \quad (1)$$

ここで、ヘンリー定数、表面被覆率は、次式で定義される。

$$H_{i(w)} = \lim_{c_{i,0} \rightarrow 0} \left(\frac{n_{i,0}}{c_{i,0}} \right) \quad (2) \quad \theta = \frac{n_{i,0}}{n_{i,0}^m} \quad (3)$$

NIAS モデルは、水分子と溶質分子の相互作用を考慮した理論式であり、 $i_w=1$, $w_i=1$ とおくと Langmuir 式になる。すなわち、吸着相における水分子と溶質分子の相互作用が無視でき、理想系の場合は Langmuir 式となることを示している。

式(1)において、飽和吸着量 $n_{i,0}^m$ 、ヘンリー定数 $H_{i(w)}$ 、Wilson 定数 i_{ws} , w_i の4つが必要となる。これらは、シングルのデータより求めた値を用いた。多溶質系の吸着等温式は以下に示す。

$$c_i = \gamma_i z_i n_T \frac{n_{i,0}^m A_{iw}}{n_T^m H_{i(w)}} \exp(A_{wi} - 1) \exp\left(\frac{\pi \bar{a}_i}{RT}\right) \quad (4)$$

ここで、右辺の各項は次式で与えられる。

$$\frac{\pi \bar{a}_i}{RT} = -\left(1 + \frac{n_T^m - n_{i,0}^m}{n_T}\right) \ln \gamma_w x_w \quad (5)$$

$$\ln \gamma_k = 1 - \ln \left(\sum_m x_m A_{km} \right) - \sum_n \left(\frac{x_n A_{nk}}{\sum_m x_m A_{nm}} \right) \quad (6)$$

$$n_T^m = \sum_i z_i n_{i,0}^m \quad (7) \quad n_T = \sum_i n_i \quad (8)$$

ここで、吸着相モル分率、solvent-free 基準の吸

着相モル分率である。 i_w と w_i は、吸着分子間の相互作用を表す二溶質系の Wilson 定数であり、 i_j および j_i 値が1からずれるほど吸着相の非理想性が大きいことが示される。

二溶質系のへの適用に必要な i_{ws} , w_i は以下のように求めた。

$$\ln i_j = -2.72 + 0.0143(t_{b,i} + t_{b,j}) \quad (9)$$

$$\ln j_i = 1.78 - 0.0103(t_{b,i} + t_{b,j}) \quad (10)$$

($t_{b,i} + t_{b,j}$: 標準沸点の和)

以下が今回使用したパラメータである。

Single パラメータ	$n_{i,0}^m$	$H_{i,w}$	i_w	w_i
アセトン(1)	7.42	0.360	0.203	5.94
ブタノール(2)	5.83	3.84	0.846	5.04
ピリジン(3)	6.43	48.0	3.67	6.56

式(9)(10)よりアセトン+ピリジン $i_j=0.788$ $j_i=0.992$

下記のグラフは NIAS モデルに適用したアセトンの吸着平衡の結果である(一例)。

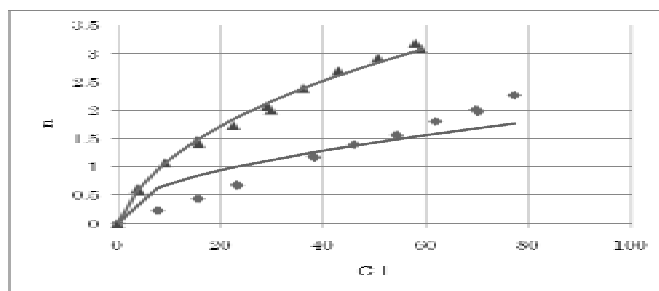


図 1 アセトンの吸着等温線 (○: アセトン単一溶質、●: アセトン+ピリジン実験値、実線: NIAS モデル)

4. 結言

今回の相関および推算の結果、単一溶質系のデータは良好に相関できているが、二溶質系のデータは若干の誤差が生じた。

今後、この誤差について検討し、二溶質系のデータが NIAS モデルに良好に推算可能になるように式を修正する必要がある。また、吸着量の異なる活性炭を用いてデータを集積し、この式が AB 炭だけでなく吸着量の異なる活性炭を使用しても適用できるように式を検討する必要がある。

参考文献

- 1) Fukuchi, K. et al., Chem. Eng. Japan, 15, 316 (1982)
- 2) 福地, 荒井: 宇部高専研究報告, 35, 27 (1989)
- 3) 小森: 宇部高専専攻科修士論文 (2005 年 3 月)

*Tel&Fax: 0836-35-5739, E-mail: fukuchi@ube-k.ac.jp