

## Κεφάλαιο 6°, Μεθανοποίηση του CO<sub>2</sub>

---

**Άσκηση 1.** Υπολογίστε τις μετατροπές και εκλεκτικότητες των διαφόρων αντιδρώντων και προϊόντων της αντίδρασης στις διαφορετικές θερμοκρασίες σε πείραμα βηματικής αύξησης της θερμοκρασίας. Χρησιμοποιείστε το φύλλο εργασίας του Excel που θα σας δοθεί.

**α)** Δημιουργήστε συγκριτικά διαγράμματα για τους 3 καταλύτες όσον αφορά τη μετατροπή του CO<sub>2</sub> και την εκλεκτικότητα και απόδοση σε CH<sub>4</sub>. Σε ποια θερμοκρασία παρατηρείται σημαντική αύξηση της μετατροπής του CO<sub>2</sub> και σε ποια θερμοκρασία παρατηρείται σημαντική αύξηση της εκλεκτικότητας ως προς CO;

**β)** Κατατάξτε τους καταλύτες (10% Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, 10% Ni/CeO<sub>2</sub>, 10% Ni/ MgO-CeO<sub>2</sub>) κατά σειρά δραστηριότητας σε θερμοκρασία 400 °C. Ποιος είναι ο καλύτερος καταλύτης για να χρησιμοποιηθεί σε αυτή τη θερμοκρασία; Δικαιολογήστε με βάση τη σύσταση του συγκεκριμένου καταλύτη. (Στην περίπτωση του υποστρώματος MgO-CeO<sub>2</sub>, η CeO<sub>2</sub> έχει τροποποιηθεί σε ποσοστό 10% με MgO)

**Άσκηση 2.** Υπολογίστε τις μετατροπές και εκλεκτικότητες των διαφόρων αντιδρώντων και προϊόντων της αντίδρασης κάθε 1 ώρα σε ένα πολύωρο πείραμα καταλυτικής σταθερότητας. Χρησιμοποιείστε το φύλλο εργασίας του Excel που θα σας δοθεί. Δημιουργήστε συγκριτικά διαγράμματα για τους 3 καταλύτες όσον αφορά τη μετατροπή του CO<sub>2</sub> και την εκλεκτικότητα και απόδοση σε CH<sub>4</sub>.

### Άσκηση 3. Σας δίνονται τα ακόλουθα Paper

#### Δημοσίευση 1: Για όσους το επώνυμο ξεκινάει από Α έως Μ

TSIOTSIAS, Anastasios I., CHARISIOU, Nikolaos D., et al., GOULA, Maria A., Optimizing the oxide support composition in Pr-doped CeO<sub>2</sub> towards highly active and selective Ni-based CO<sub>2</sub> methanation catalysts. Journal of Energy Chemistry, 2022, 71: 547-561.

Απαντήστε στα ακόλουθα:

- I. Με ποια μέθοδο παρασκευάστηκαν οι φορείς/υποστρώματα τροποποιημένης με πρασεοδύμιο δημητριάς (Pr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-CeO<sub>2</sub>) και με ποια μέθοδο εισήχθη η ενεργή φάση του Νί στα υποστρώματα;  
*Συμβουλευτείτε και το κεφάλαιο που αναφέρεται στις τεχνικές παρασκευής των υλικών.*
- II. Περιγράψτε συνοπτικά τις συνθήκες της αντίδρασης μεθανοποίησης (Βάρος καταλύτη, προκατεργασία, ταχύτητα χώρου κτλ.).
- III. Σε ποια περίπτωση (με ποιο ποσοστό τροποποίησης με Pr) οδηγούμαστε σε καλύτερη επίδοση για την αντίδραση της μεθανοποίησης του CO<sub>2</sub>; Κατατάξτε τους καταλύτες κατά σειρά δραστηριότητας.
- IV. Περιγράψτε συνοπτικά που οφείλεται η εμφάνιση κορυφών στα προφίλ H<sub>2</sub>-TPR κατά την αναγωγή των υποστρωμάτων και των πυρωμένων καταλυτών.
- V. Πως επηρεάζουν οι κενές θέσεις οξυγόνου (O<sub>v</sub> ή V<sub>O</sub><sup>••</sup>) τα φάσματα Raman των υποστρωμάτων και των καταλυτών;
- VI. Περιγράψτε συνοπτικά τα είδη του επιφανειακού Ni, όπως αυτά ανιχνεύονται μέσω της τεχνικής XPS  
*Συμβουλευτείτε και το κεφάλαιο που αναφέρεται στις τεχνικές χαρακτηρισμού των υλικών.*

Δημοσίευση 2: Για όσους το επώνυμο ξεκινάει από Ν έως Ω

TSIOTSIAS, Anastasios I., CHARISIOU, Nikolaos D., et al., GOULA, Maria A., Enhancing CO<sub>2</sub> methanation over Ni catalysts supported on sol-gel derived Pr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-CeO<sub>2</sub>: An experimental and theoretical investigation. Applied Catalysis B: Environmental, 2022, 318: 121836.

Απαντήστε στα ακόλουθα:

- I. Με ποιες μεθόδους παρασκευάστηκαν οι φορείς/υποστρώματα τροποποιημένης με πρασεοδύμιο δημητριάς (Pr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-CeO<sub>2</sub>) και με ποια μέθοδο εισήχθη η ενεργή φάση του Νί στα υποστρώματα;  
*Συμβουλευτείτε και το κεφάλαιο που αναφέρεται στις τεχνικές παρασκευής των υλικών.*
- II. Περιγράψτε συνοπτικά τις συνθήκες της αντίδρασης μεθανοποίησης (Βάρος καταλύτη, προκατεργασία, ταχύτητα χώρου κτλ.).
- III. Λαμβάνοντας υπόψιν τα περιθλασιγράμματα XRD των καταλυτών, που οφείλεται η διεύρυνση της κορυφής (111) του νικελίου;
- IV. Που οφείλεται το διαφορετικό πορώδες μεταξύ των υποστρωμάτων και γιατί υπάρχει μείωση του πορώδους μετά την εισαγωγή του Νί;
- V. Περιγράψτε συνοπτικά που οφείλεται η εμφάνιση κορυφών στα προφίλ H<sub>2</sub>-TPR κατά την αναγωγή των υποστρωμάτων και των πυρωμένων καταλυτών.
- VI. Περιγράψτε συνοπτικά το ρόλο των επιφανειακών βασικών θέσεων των καταλυτών, όπως προκύπτουν από τα προφίλ CO<sub>2</sub>-TPD.  
*Συμβουλευτείτε και το κεφάλαιο που αναφέρεται στις τεχνικές χαρακτηρισμού των υλικών.*
- VII. Σε ποιες περιπτώσεις (με ποια μέθοδο σύνθεσης του υποστρώματος) οδηγούμαστε σε καλύτερη επίδοση για την αντίδραση της μεθανοποίησης του CO<sub>2</sub>; Κατατάξτε τους καταλύτες κατά σειρά δραστικότητας.