

# Praca dyplomowa inżynierska

## Symulacja procesu krystalizacji i aglomeracji nanometrycznych kryształów $\text{CaCO}_3$ otrzymywanych w reaktorze z obrotowymi dyskami



**Autor: Nikodem Dąbrowski**

Nr albumu: 311990

Promotor: prof. dr. hab. inż. Paweł Gierycz

Rok akademicki: 2023/2024

### Wprowadzenie

Nanomateriały – substancje, które składają się z cząstek o rozmiarze pomiędzy 1 a 100 nm – mają potencjał do zrewolucjonizowania wielu dziedzin życia człowieka. Jednym z interesujących zastosowań jest wykorzystanie porowatych nanocząstek jako nośników leków, efektywnie wspomagając terapię. Nanometryczny węglan wapnia otrzymywany w reaktorze z obrotowymi dyskami jest obiecującym związkiem do tego zastosowania.

### Cel i zakres pracy

Celem pracy jest symulacja procesu nukleacji oraz aglomeracji nanometrycznych kryształów  $\text{CaCO}_3$  w reaktorze z obrotowymi dyskami. Zakres pracy obejmuje:

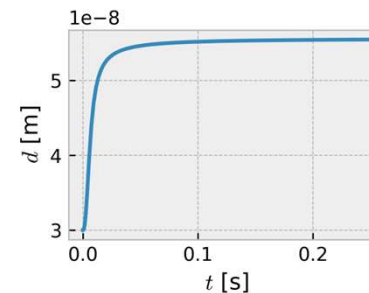
- Przegląd literaturowy na temat węglanu wapnia oraz teorii nukleacji i aglomeracji
- Wybór języka programowania
- Implementację programów obliczeniowych
- Wizualizację wyników oraz krytyczną analizę wyników symulacji

### Proces nukleacji kryształów

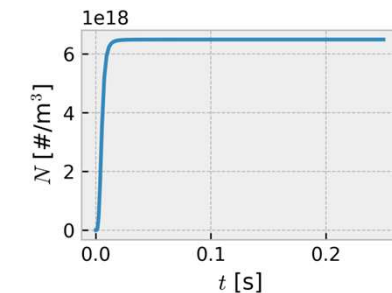
Proces nukleacji rozpoczyna się gdy do komory reaktora wprowadzony jest czysty dwutlenek węgla. W komorze obracają się dyski zanurzone w nasyconym roztworze węglanu wapnia. W cienkim filmie cieczy na dysku następuje absorpcja czynnika gazowego z reakcją chemiczną. W symulacji nukleacji rozważa się jeden obrót dysku, w czasie którego następuje reakcja chemiczna, zarodkowanie kryształów oraz ich wzrost. Program obliczeniowy rozwiązuje 3 równania różniczkowe (bilanse masowe  $\text{CO}_2$ ,  $\text{Ca}(\text{OH})_2$ ,  $\text{CaCO}_3$ ), oraz 2 równania kinetyczne (szybkość wzrostu i zarodkowania kryształów). Założenia oraz wielkości fizykochemiczne użyte w symulacji wynikają z prób eksperymentalnych, które znaleźć można w literaturze.

### Proces aglomeracji kryształów

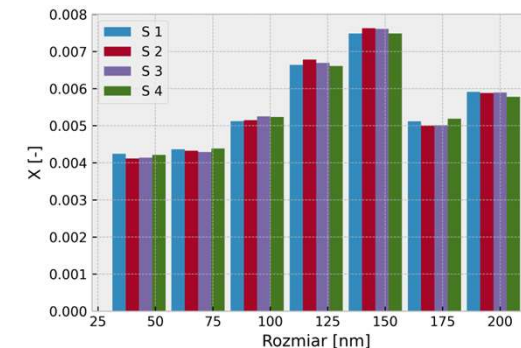
Proces aglomeracji rozpoczyna się gdy do roztworu w reaktorze trafiają pierwsze kryształy węglanu wapnia. Aglomeracja kryształów polega na łączeniu się mniejszych kryształów w większe, w skutek czego zmienia się całkowita liczba kryształów w układzie i rośnie ich średni rozmiar. W symulacji zdecydowano się zignorować istniejące modele teoretyczne i rozpatrzeć proces probabilistycznie. Program monitoruje globalną liczbę kryształów w układzie, a następnie losowo wybiera część kryształów, które ulegną zderzeniom. Zderzenia mogą być konstruktywne bądź destruktywne.



Wyk 1. Rozmiar kryształów od czasu (nukleacja)



Wyk 2. Liczba kryształów od czasu (nukleacja)



Wyk 3. Końcowy rozkład kryształów (aglomeracja)

### Wnioski

Sporządzone programy obliczeniowe dostarczają ciekawych przesłanek na temat natury zjawiska zarodkowania i wzrostu kryształów w reaktorze. Wytworzone kryształy zwiększają swój rozmiar podczas jednego obrotu o co najmniej 10%. Wartości stałej kinetycznej nukleacji kryształów  $\text{CaCO}_3$ , którą można znaleźć w cytowanej literaturze jest prawdopodobnie zbyt mała. Aglomeracja w uproszczonym podejściu z powodzeniem może być traktowana jako proces losowy, na który wpływu nie ma stan układu, a jedynie liczba indywiduów.