

II-399 IAS理論による多成分系吸着平衡のシミュレーション

岐阜大学工学部 ○正会員 田中 理博

岐阜大学工学部 正会員 湯浅 晶

1. 目的 単成分系吸着における活性炭吸着除去特性は、回分式吸着平衡試験から得られる吸着等温線によって評価される。しかし他に数多くの成分が共存する原水に対する吸着試験で得られる各成分の吸着等温線は、単成分系での吸着等温線に比べて吸着量が著しく低下したものとなる。その低下の度合は各成分の吸着性の強弱のみならず原水中での各成分の存在割合に大きく左右される。本研究はこのような多成分系における各成分の吸着平衡特性を理解するために、IAS理論を用いてシミュレーションを行なったものである。

2. IAS (Ideal Adsorbed Solution) 理論

IAS理論は、固液界面での吸着相が理想溶液であると仮定して導かれた多成分系吸着平衡の理論である¹⁾²⁾。各成分の単成分系での吸着等温線がフロイントリッヒ式 $q_i = k_i \cdot C_i^{1/n_i}$ で表わされる場合には、多成分系における平衡関係は次式で与えられる³⁾。

$$C_i = (q_i / q_s) (\pi / k_i)^{n_i} \quad (1)$$

$$\text{ただし、全吸着量 } q_s = \sum q_i \quad (2)$$

$$\text{表面圧 } \pi = (RT/A) \sum n_i q_i \quad (3)$$

ここで C_i (mol/l), q_i (mol/g) は成分 i の濃度と吸着量、 R : 気体定数, T : 絶対温度, A : 活性炭の比表面積 (cm^2/g)、表面圧 π (dyn/cm) は吸着による固液界面の張力減少分を表わす。

これらの式と、回分吸着における物質収支式

$$q_i = (C_{i0} - C_i) / m \quad (4)$$

とを連立させて解くことによって、ある活性炭添加量 m (g/l) での回分吸着における各成分の平衡濃度 C_i と吸着量 q_i を計算することができる。

3. 計算例-(1) 表1に示すように、単成分系吸着特性の異なる20の成分から成る原水を仮想して、活性炭添加量を0.01~10 (g/l) と変えた場合の吸着平衡状態を数値計算により求めた。数値結果を図1~3に示す。活性炭添加量を増加するにつれて、吸着性の強い(表1における k_i 値が大きい)ものから順々に除去される様子が図1に示される。図2に示した三つの成分の吸着等温線は、それぞれが単成分系での吸着量よりも低下している。特に吸着性が弱い成分の場合には、初期濃度 C_{i0} に近づくにつれて吸着量が著しく低下することが示される。このような初期濃度近傍での吸着量の低下を多少なりとも示した成分を表1の第1欄に*印を付して示す。

表面圧 π と全吸着量 q_s の相関は非常によく(ほぼ比

例相関)、したがって式(1)は次式で近似しうることが各成分について示された(図3の例を参照)。

$$q_i / C_i = f_i(q_s) \quad (5)$$

$$\propto K_i^{n_i} \cdot q_s^{1-n_i} \quad (6)$$

上式は、成分 i の平衡関係が全吸着量 q_s をパラメータとする直線平衡

$$q_i = f_i(q_s) \cdot C_i \quad (7)$$

で近似表現しうること示唆している。

4. 計算例-(2) 表1におけるNo.7の成分(中程度の吸着性)の初期濃度が $C_{i0} = 2, 4, 6, \dots, 20$ ($\mu\text{mol/l}$) と変化した場合の仮想原水について数値計算を行なった。ただし他の成分の初期濃度は表1と同じままである。計算結果を図4のプロットで示す。図中の実線は $C_{i0} = 10$ ($\mu\text{mol/l}$) の場合(即ち計算例(1))の q_i および $F_i(q_s)$ の値を用いて式(7)を示したものであり、プロットとよく一致している。他の成分に関して同様の数値計算を行なった場合にもやはり、計算結果は式(7)とよく一致した。このことはある原水に対する吸着試験で得られる図3のようなデータを基にして、着目成分の初期濃度変動した場合の処理効率を予測しうること示唆している。

表1. 仮想原水の組成

成分番号 i	単成分系吸着等温線 フロイントリッヒ定数 k_i	$1/n_i$	初期濃度 C_{i0}
1*	1 0	0.3	1 0
2*	2 0	0.3	1 0
3*	5 0	0.3	1 0
4*	1 0 0	0.4	1 0
5*	1 5 0	0.3	1 0
6*	2 0 0	0.2	1 0
7*	2 0 0	0.3	1 0
8*	2 0 0	0.4	1 0
9*	2 0 0	0.5	1 0
10*	4 0 0	0.2	1 0
11*	4 0 0	0.3	1 0
12*	4 0 0	0.4	1 0
13	4 0 0	0.5	1 0
14*	7 0 0	0.2	1 0
15*	7 0 0	0.3	1 0
16	7 0 0	0.4	1 0
17	7 0 0	0.5	1 0
18*	1 0 0 0	0.2	1 0
19	1 0 0 0	0.4	1 0
20	1 5 0 0	0.3	1 0

ただし、 C_i, C_{i0} [$\mu\text{mol/l}$]
 q_i [$\mu\text{mol/g}$]

参考文献

- 1)AIChE Journal, Vol.11, pp.121-127 (1965).
- 2)AIChE Journal, Vol.18, pp.761-768 (1972).
- 3)Environmental Science & Technology, Vol.19, pp.1037-1043 (1985).

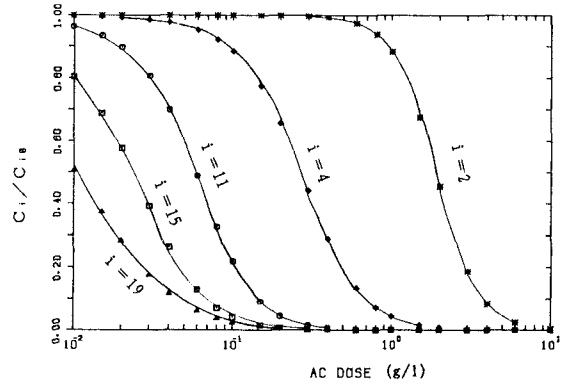


図1. 活性炭添加量と各成分の残存率 C_i / C_{i0} の関係

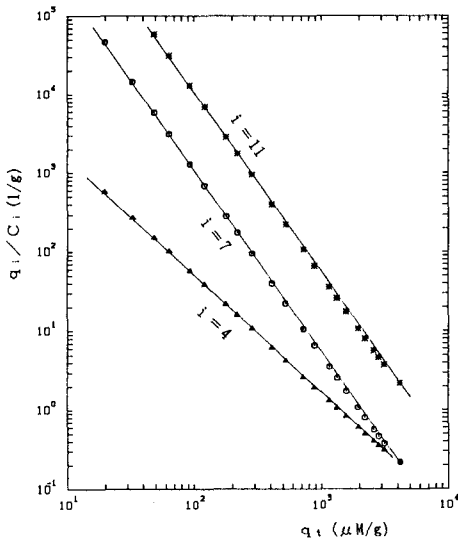


図3. q_i と q_i / C_i の相関

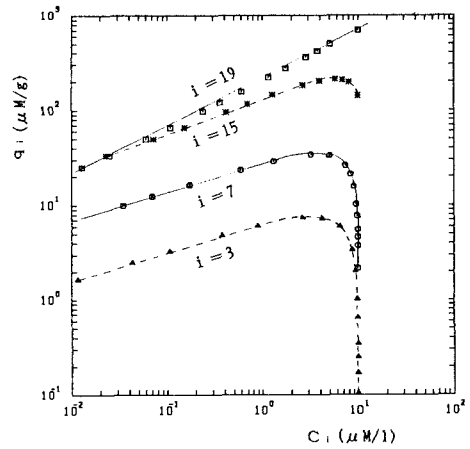


図2. 各成分の吸着等温線

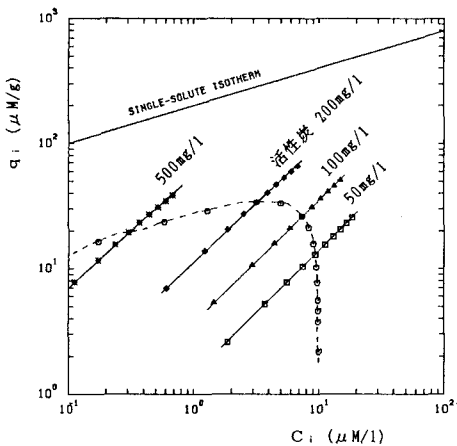


図4. 計算例(2)の結果(成分No.7の吸着等温線)

