

II-404 原水の希釈・濃縮が多成分系吸着平衡に及ぼす影響に関する研究
- I A S理論によるシミュレーション -

セイノー情報サービス (正)○村瀬 泰基
岐阜大学 (正)湯浅 晶 岐阜大学 (正)田中 理博

1)目的 実際の水のような多成分系原水の活性炭吸着実験で求められる吸着等温線(全成分合計量についての吸着等温線)は成分組成の変動に左右されて変化する。本研究では、ある原水の希釈・濃縮により初期濃度が変動した試料の吸着等温線を I A S理論(Ideal Adsorbed Solution Theory)に基づくシミュレーションにより求め、それぞれの吸着等温線の関連性を検討することを目的とする。

2) I A S理論 I A S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吸着平衡の理論である。各成分の単成分系での吸着等温線がFreundlich式($q_i = K_i \cdot C_i^{1/n_i}$)で表される場合には、多成分系での平衡関係は次式で表される。

$$C_i = (q_i / q_t) (\pi / K_i)^{n_i} \quad (1)$$

$$\text{ただし、全成分合計吸着量 } q_t = \sum q_i \quad (2)$$

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

ここで、 C_i (mol/l)、 q_i (mol/g)は成分*i*の平衡濃度と平衡吸着量。 K_i 、 n_i は成分*i*のFreundlich定数。R: 気体定数、T: 絶対温度、A: 活性炭の比表面積(cm²/g)、表面圧 π (dyn/cm)(吸着による固液界面の張力減少分)

これらの式と、回分吸着における物質収支式

$$q_i = (C_{i0} - C_i) V / m, \quad m \neq 0 \quad (4)$$

とを連立させて解くことによって、ある活性炭添加量での回分吸着における各成分の平衡濃度 C_i と平衡吸着量 q_i を計算することができる。ただし、 m (g):活性炭添加量、V(l):試料水量。また、 $m=0$ (あるいは $V=\infty$)の場合には $C_i = C_{i0}$ とおいて式(1)～(3)を解くことにより算出される q_i の値は連続式吸着(固定層など)での平衡状態(全成分について、流出濃度 C_i が流入濃度 C_{i0} に等しくなった状態)における吸着量 q_{i0} を表す。

3)計算条件 表1に示すように、単成分系吸着特性の異なる27種類の成分から成る原水を想定して、成分の初期濃度をそれぞれ一律に、0.2, 0.5, 1.0, 1.5, 2.0, 3.0, 4.0, 5.0倍した試料の吸着平衡状態を数値計算により求めた。尚、活性炭添加量は、0～10g/lの範囲で設定した。

4)計算結果 全成分合計量で表した吸着等温線、即ち全成分合計濃度 C_t (= $\sum C_i$)と全成分合計吸着量 q_t (= $\sum q_i$)の関係を図1に示す。実線で示した

のが各試料の回分式吸着で得られる吸着等温線であり、初期濃度 C_{t0} が高い試料ほど吸着等温線が図の右側へとシフトすることが示される。また各試料の C_{t0} (= $\sum C_{i0}$)と q_{t0} (= $\sum q_{i0}$)の点を結んだ破線は連続吸着で得られる吸着等温線を表しており、初期濃度 C_{t0} が高いほど吸着量 q_{t0} が増加することが示される。

回分式吸着による各試料の吸着等温線の形状は互いによく似ており、補正濃度 C_t / C_{t0} と補正吸着量 q_t / q_{t0} で表した各試料の補正吸着等温線は、図2に示されるように、ほぼ一本の吸着等温線に収束することが明かである。このことは、任意の率で原水を濃縮・希釈した試料の吸着等温線を予測しうることを示している。

成分毎の吸着等温線は原水の希釈・濃縮によって大きく変化するものの、各成分の吸着量と濃度の比率 q_i / C_i は全成分合計吸着量 q_t と良好な相関を示し、この相関は原水の希釈・濃縮の影響を受けない(図3)。したがって、ある成分*i*の q_i / C_i 比と別の成分*j*の q_j / C_j 比との間に図4に示されるような良好な相関が示された。

表1 仮想原水の設定

成分番号 <i>i</i>	単成分系における定数 フロイドリッヒ k_i $1/n_i$ (*)	成分数の初期濃度 C_{i0}
1	5	0.3
2	10	0.4
3	20	0.5
4	30	0.2
5	50	0.3
6	60	0.4
7	70	0.5
8	80	0.2
9	90	0.3
10	100	0.4
11	120	0.5
12	150	0.2
13	200	0.3
14	220	0.4
15	250	0.5
16	300	0.2
17	400	0.3
18	700	0.4
19	1000	0.5
20	1500	0.2
21	10	0.35
22	20	0.35
23	50	0.35
24	100	0.35
25	200	0.35
26	500	0.35
27	1000	0.35

(*) $q_i = k_i \cdot C_i^{1/n_i}$
ただし、 C_i (μmol/l)、 q_i (μmol/l)とする。

希釈濃縮率

- …… 0.2 (希釈)
- …… 0.5 (希釈)
- △ …… 1.0 (原水)
- × …… 1.5 (濃縮)
- ◊ …… 2.0 (濃縮)
- ◊ …… 3.0 (濃縮)
- …… 4.0 (濃縮)
- ◆ …… 5.0 (濃縮)

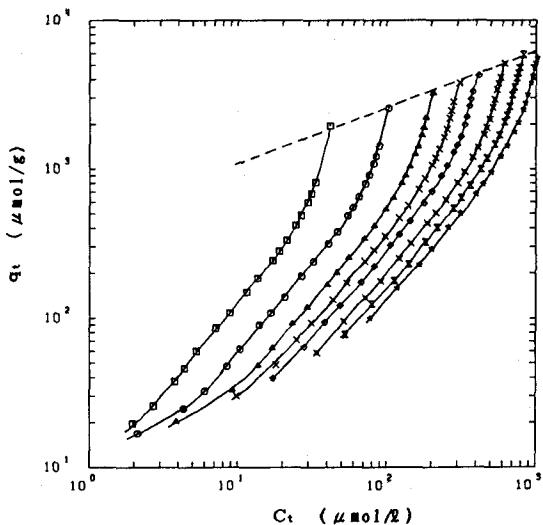


図 1 全成分合計の吸着等温線

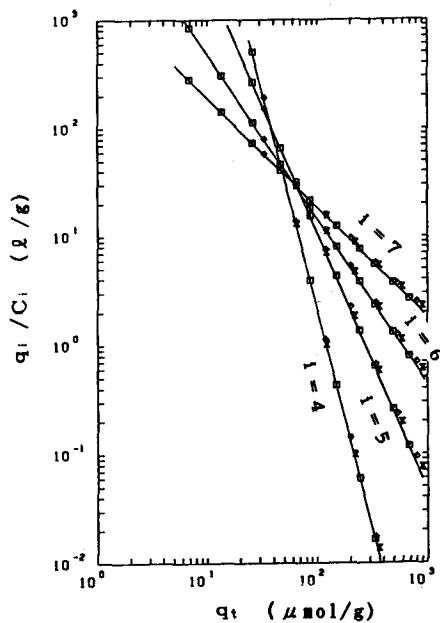


図 3 q_i/C_i と q_t の相関

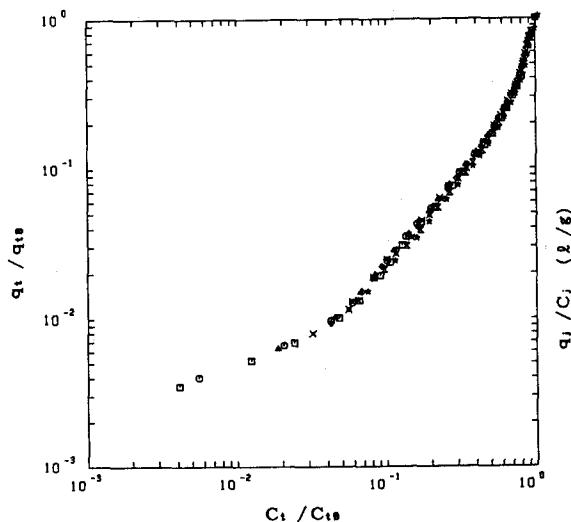


図 2 補正吸着等温線

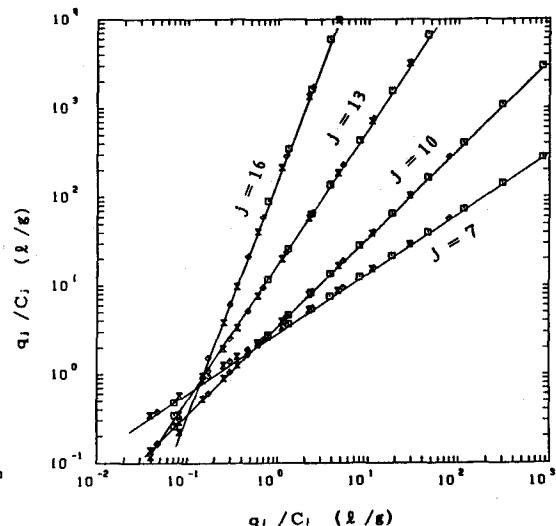


図 4 q_i/C_i ($i=6$) と q_j/C_j の相関