

MODELING AND SIMULATION OF HETEROGENEOUS CATALYTIC REACTIONS: FROM THE MOLECULAR PROCESS TO THE TECHNICAL SYSTEM

a cura di O. Deutschmann

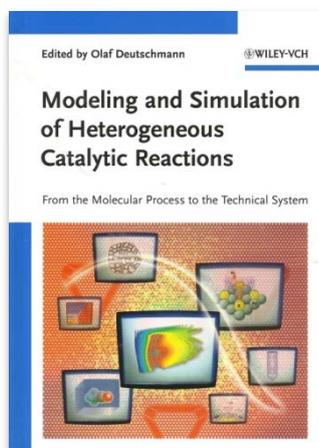
Wiley-VCH

Pag. 370, rilegato, 144 euro, ebook 126 euro

ISBN 3-527-32120-9

Oggigiorno, la catalisi eterogenea è necessaria per la maggior parte dei processi chimici industriali, per ridurre le emissioni degli autoveicoli, per la produzione di elettricità mediante le celle a combustibile e per numerosi dispositivi che utilizzano l'energia solare (sistemi fotocatalitici).

Con il progressivo aumento della potenza di calcolo dei computer avvenuto nel corso degli ultimi decenni, è stato possibile realizzare algoritmi in grado di risolvere sistemi di equazioni non lineari, nonché modellare e simulare numericamente diversi processi catalitici.



In generale, la modellazione dei processi molecolari avviene mediante calcoli quanto-meccanici, con la teoria del funzionale della densità (DFT, Density Functional Theory), con dinamiche molecolari e con simulazioni Monte Carlo; tuttavia, gli aspetti ingegneristici dei processi solitamente non vengono presi in considerazione. D'altro canto, i fenomeni di trasporto nei reattori e nei processi catalitici possono essere studiati attraverso la fluidodinamica computazionale o numerica (brevemente detta CFD, Computational Fluid Dynamics) trascurando, tuttavia, i dettagli delle micro-cinetiche.

Questo libro considera diversi aspetti, dallo stato dell'arte della modellazione e della simulazione dei fenomeni molecolari, allo studio delle reazioni catalitiche eterogenee, secondo una prospettiva ingegneristica. Infatti, negli ultimi anni è stato sempre più necessario modellare e simulare i processi catalitici considerando sia gli aspetti legati alla scienza delle superfici (catalisi molecolare) sia quelli relativi all'ingegneria chimica (catalisi industriale).

Il libro inizia con un capitolo sulla teoria del funzionale della densità, in cui si introducono i concetti fondamentali del calcolo DFT per le reazioni di superficie e vengono riportate alcune applicazioni d'interesse per la catalisi eterogenea. Il secondo capitolo è invece dedicato allo studio delle reazioni di superficie. Le simulazioni dinamiche prevedono il moto di una molecola su una superficie catalitica, ma in genere tali previsioni sono ristrette alla scala dei femtosecondi. Tuttavia, quando l'interesse è rivolto a stabilire se un determinato fenomeno chimico-fisico (adsorbimento, diffusione, o reazione) possa avvenire o meno, le simulazioni Monte Carlo (MC) forniscono risposte maggiormente affidabili (in senso statistico). Il metodo MC è quindi illustrato nel cap. 3. Nel quarto capitolo, invece, si affronta lo studio delle cinetiche di reazione per i processi catalitici eterogenei e per le reazioni in fase gas (catalisi omogenea).

Nella seconda parte del libro vengono presi in considerazione i fenomeni macroscopici. Il cap. 5 esamina le interazioni tra le reazioni di superficie ed il trasporto molecolare di reagenti e prodotti all'interno dei materiali catalitici porosi, mentre nel sesto capitolo viene illustrato l'effetto del trasferimento di carica elettrochimica nelle celle a combustibile.

Il cap. 7 considera l'applicabilità di diversi modelli cinetici per alcuni sistemi catalitici e ne esamina l'accoppiamento con i fenomeni di trasporto. L'interazione tra i fenomeni di trasporto ed i processi chimici per i sistemi a multifase, viene ben approfondita nel cap. 8. Gli ultimi due capitoli del libro considerano, invece, i benefici ed i limiti della modellazione e della simulazione nella moderna industria della chimica e nel settore automobilistico.

Pertanto, il libro rappresenta una buona introduzione ad un settore di ricerca in rapida espansione e che considera sempre più gli effetti a multi-scala. Infatti, accoppiando i processi molecolari (catalisi molecolare) con quelli su scala macroscopica (per esempio cinetiche di reazione e fenomeni di trasporto) emergono sinergie.

Marco Piumetti