

Hoe een katalysator dichtslibt

Door elektronica geïnspireerde simulatie voorspelt effect van metaaldeeltjes.

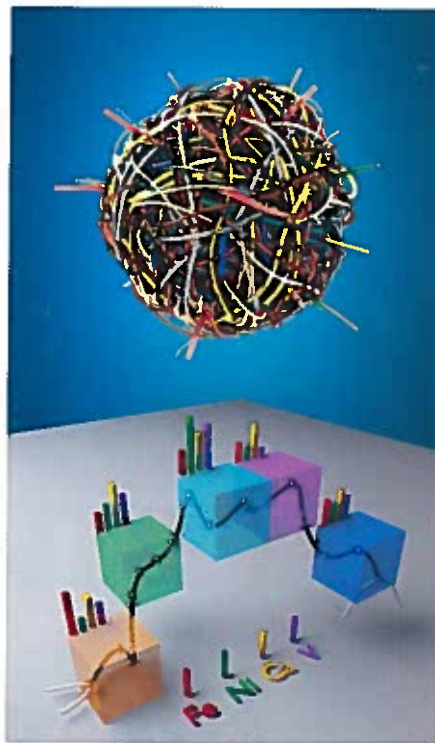
Voor het eerst is te voorspellen wat zware metalen in ruwe olie doen met katalysatordeeltjes in een kraakinstallatie. Zo kun je wellicht deeltjes ontwerpen met poriën die minder snel verstopt raken, schrijven Utrechtse en Amerikaanse onderzoekers in *Nature Communications*.

Zulke *fluid catalytic cracking*-deeltjes meten 50 à 100 μm en bestaan uit een mix van onder meer zeolieten, aluminiumoxide en inerte klei. Aardolie bereikt de actieve componenten via een netwerk van miljarden poriën die samen naar schatting 1,3 m lang zijn, met diameters van minder dan 2 tot meer dan 50 nm. Maar zware metalen zoals ijzer, nikkel en vanadium, die al in de olie zaten of vrijkomen door slijtage van pompen en leidingen, verstoppem die poriën.

De door Florian Meirer en Bert Weckhuyzen ontwikkelde simulatie komt erop neer dat je katalysatordeeltjes weergeeft als elektrische netwerken. Elk poriekanaal is een weerstandje, met een ohmse waarde die afhangt van lengte en diameter. De actieve plekken beschouw je als stroombron, het buitenoppervlak als geaard. Bij elk knooppunt van poriekanaalen kun je dan een elektrische potentiaal berekenen, en daarmee de moeite die het oliemoleculen in een echte katalysator zou kosten om daar te komen. Het dichtslibben simuleer je door alle verbindingen te verwijderen met een weerstand die boven een geleidelijk dalende drempelwaarde zit.

De simulaties laten zien dat het vrij lang duurt eer een knooppunt echt niet meer bereikbaar is. De olie kan kiezen tussen veel alternatieve routes, en daar mogen er best een paar van dichtslibben. Pas als delen van het netwerk vrijwel afgesloten raken, zie je effect.

De Utrechters hebben tevens een aantal deeltjes uit een echt raffinageproces laten doorlichten in de Stanford SLAC-deeltjesversneller. Met een combinatie van röntgentechnieken konden ze vaststellen hoe het porienetwerk er in werkelijkheid ongeveer uitziet en waar de zware metalen belanden. Toch blijven de simulaties vol onzekerheden zitten, mede omdat nog onduidelijk is hoeveel metaal in een poriekanaal moet stranden om het echt af te sluiten. (AD) ●



Zo moet je je een FCC-katalysatordeeltje ongeveer voorstellen.