

ADAM ROTKEGEL<sup>1,2</sup>, ZENON ZIOBROWSKI<sup>1</sup>

## POCHŁANIANIE DITLENKU WĘGLA W KOLUMNIE ZRASZANEJ CIECZĄ JONOWĄ. CZĘŚĆ II – MODEL MATEMATYCZNY I WYNIKI OBLICZEŃ

<sup>1</sup>Institut Inżynierii Chemicznej PAN, ul. Bałtycka 5, 44-100 Gliwice

<sup>2</sup>Politechnika Opolska, Wydział Inżynierii Produkcji i Logistyki, ul. Gen. Sosnkowskiego 31, 45-272  
Opole

W pracy przedstawiono model matematyczny procesu usuwania ditlenku węgla z gazów w kolumnie wypełnionej zraszanej cieczami jonowymi [Bmim][Ac] i [Emim][Ac]. Uzyskane dane doświadczalne porównano z wynikami obliczeń prowadzonych według opracowanego modelu procesu uzyskując dobrą zgodność obliczeń z danymi eksperymentalnymi.

**Słowa kluczowe:** absorpcja CO<sub>2</sub>, kolumna wypełniona, ciecze jonowe.

The mathematical model of carbon dioxide removal from gases in a packed column using ionic liquids [Bmim][Ac] and [Emim][Ac] was presented. Experimental data obtained in previous work was compared with calculations results carried out using developed mathematical model of the process with good agreement with experimental data.

**Keywords:** CO<sub>2</sub> absorption, packed column, ionic liquids.

### 1. MODEL MATEMATYCZNY PROCESU

Ciecze jonowe zawierające anion octanowy, takie jak [Emim][Ac] czy [Bmim][Ac] są bardzo obiecujące jako absorbent dwutlenku węgla, głównie ze względu na dominujący charakter reakcji chemicznej [1].

Sugerowany mechanizm reakcji z grupą karboksylową zaproponowano w pracy Marginna [2]. Anion octanowy deprotonuje kation [Emim]<sup>+</sup>, [Bmim]<sup>+</sup> przy drugim węglu w pierścieniu imidazolowym. Rozpuszczony CO<sub>2</sub> reaguje z ujemnie naładowa-

nym atomem tworząc formację karboksylową. Dla [Bmim][Ac] mechanizm reakcji jest bardziej skomplikowany, ze względu na różnice rozpuszczalności w dwóch różnych zakresach [3,4]. Pierwszy zdominowany jest przez reakcję chemiczną CO<sub>2</sub> z formacją karboksylową, (ułamek molowy CO<sub>2</sub> mniejszy niż 0,35). W drugim zakresie reakcja zatrzymuje się i dominujący charakter wykazuje absorpcja fizyczna.

Reakcja cieczy jonowej z CO<sub>2</sub> może być traktowana jako reakcja pseudo-pierwszego rzędu w odniesieniu do CO<sub>2</sub> [5]. Reakcja chemiczna w fazie ciekłej powoduje zwiększenie strumienia dyfundującej masy. Opisujący to zjawisko współczynnik wzmocnienia  $E$  zdefiniowany jest jako iloraz strumienia masy w procesie absorpcji z zachodzącą reakcją chemiczną, do strumienia wymienionej masy, gdy zachodzi jedynie absorpcja fizyczna.

W modelu matematycznym do opisu ogólnego współczynnika transportu masy  $K_{ov}$  zastosowano model sumowania oporów dyfuzyjnych w fazie ciekłej i gazowej [6-8]. Uwzględniając reakcję chemiczną w fazie ciekłej wyrażoną przez współczynnik wzmocnienia  $E$ , można napisać:

$$\frac{1}{K_{ov}} = \frac{1}{k_G} + \frac{H}{Ek_L} \quad (1)$$

gdzie  $k_G$  i  $k_L$  są współczynnikami wnikania masy w fazie ciekłej i gazowej,  $E$  jest współczynnikiem wzmocnienia dla reakcji absorpcji CO<sub>2</sub> w fazie ciekłej, a  $H$  jest stałą Henryego zdefiniowaną jako:

$$H = \frac{y^* \rho_G}{x^* \rho_L} \quad (2)$$

Iloraz ułamka molowego CO<sub>2</sub> w fazie gazowej i ciekłej wyraża stałą absorpcji  $K_a$

$$K_a = \frac{y^*}{x^*} \quad (3)$$

Współczynnik wzmocnienia  $E$  wyznaczony z uproszczonego równania DeCourseya [9] w przypadku reakcji pseudo-pierwszego rzędu można zapisać jako:

$$E = \sqrt{1 + Ha^2} \quad (4)$$

gdzie liczba Hatty może być przedstawiona jako iloraz czasu dyfuzji i czasu reakcji

$$Ha^2 = \frac{\tau_{diffusion}}{\tau_{reaction}} \quad (5)$$

Duże wartości liczby Hatty wskazują, że czas dyfuzji jest znacznie dłuższy niż czas reakcji, i stąd reakcja chemiczna zachodzi w filmie cieczy.

Głównym celem modelu matematycznego jest opisanie procesu absorpcji CO<sub>2</sub> z towarzyszącą reakcją chemiczną w kolumnie wypełnionej, przy wykorzystaniu współczynnika wzmocnienia  $E$  jako parametru modelu. Ponieważ w literaturze brak jest danych kinetycznych dla reakcji CO<sub>2</sub> z cieczami jonowymi, wartości współczynnika

wzmocnienia estymowano z danych eksperymentalnych, a następnie użyto do obliczenia strumieni masowych CO<sub>2</sub> absorbowanych w cieczach jonowych.

Założenia do modelu matematycznego i uproszczenia:

- reakcja CO<sub>2</sub> z cieczami jonowymi jest rozpatrywana jako pseudo-pierwszego rzędu w odniesieniu do CO<sub>2</sub>,
- proces zachodzi w warunkach izobarycznych i adiabatycznych,
- na powierzchni międzyfazowej zachodzi równowaga gaz-ciecz,
- zgodnie z teorią filmu opór transportu masy zachodzi jedynie w cienkiej warstwie przyściennej,
- współczynnik wzmocnienia E jest estymowany z danych doświadczalnych.

Strumień wymiany masy może być obliczony z równań bilansowych w fazie gazowej:

$$N_{\text{CO}_2} = \frac{V_G}{A} (y_{\text{in}} - y_{\text{out}}) = K_{\text{OV}} \left( \frac{\bar{y} - K_a \bar{x}}{\bar{y}_{i,m}} \right) \quad (6)$$

Strumień wymienianego CO<sub>2</sub>, w fazie gazowej i ciekłej, między rdzeniem fazy a powierzchnią międzyfazową jest taki sam i może być zapisany jako:

$$N_{\text{CO}_2} = Ek_L \left( \frac{\bar{x} - \bar{x}^*}{\bar{x}_{i,m}} \right) = k_G \left( \frac{\bar{y}^* - \bar{y}}{\bar{y}_{i,m}} \right) \quad (7)$$

Aby otrzymać profile zmiany koncentracji CO<sub>2</sub> w gazie i w cieczy należy rozwiązać równanie różniczkowe (8). Na każdym kroku całkowania równania wartość  $y_{\text{out}}$  była obliczana zgodnie z równaniami (6) i (7).

$$\frac{dx}{d\tau} = \frac{AN_{\text{CO}_2}}{G_L}$$

dla warunków brzegowych

$$\tau = 0 \rightarrow x = 0 \quad (8)$$

W konsekwencji zmiana stężenia CO<sub>2</sub> w fazie ciekłej w czasie była wyrażona zależnością:

$$x(\tau) = \int_0^\tau \frac{AN_{\text{CO}_2}}{G_L} d\tau \quad (9)$$

Dane równowagowe gaz-ciecz dla CO<sub>2</sub> i cieczy jonowych [Emim][Ac] i [Bmim][Ac] podane zostały przez Shiflett et al. [3, 10].

Współczynnik wnikania masy w fazie ciekłej był obliczany z zależności dla przepływu laminarnego i przejściowego [11]:

$$\begin{aligned}
 k_L &= 3,76 \text{Re}^{-1/3} & \text{for } \text{Re}^{2/3} \text{Sc}^{1/2} \left( \frac{v_z}{h} \right)^{1/2} < 5,17 \\
 k_L &= 0,725 \text{Re}^{1/3} \text{Sc}^{1/2} \left( \frac{v_z}{h} \right)^{1/2} & \text{for } \text{Re}^{2/3} \text{Sc}^{1/2} \left( \frac{v_z}{h} \right)^{1/2} > 5,17
 \end{aligned} \tag{10}$$

Współczynniki dyfuzji CO<sub>2</sub> w imidazolowych cieczach jonowych obliczono zgodnie z zależnością podaną przez Morgan et al. [12]:

$$D_{\text{CO}_2} = 2,66 \times 10^{-3} \frac{1}{\mu_2^{0,66} \bar{V}_1^{1,04}} \tag{11}$$

gdzie  $\mu_2$  jest lepkością cieczy jonowej wyrażoną w cP, a  $\bar{V}_1$  jest objętością molową CO<sub>2</sub> w temperaturze wrzenia pod ciśnieniem 1 atm. (33,3 cm<sup>3</sup>/mol). Tak otrzymane współczynniki dyfuzji wyrażone są w cm<sup>2</sup> s<sup>-1</sup>.

Współczynnik wnikania masy w fazie gazowej obliczono z korelacji Van Krevelena i Hoftijzera [13]:

$$\text{Sh} = 0,11 \text{Re}^{0,8} \text{Sc}^{0,33} \tag{12}$$

## 2. WYNIKI OBLICZEŃ I PORÓWNANIE Z DANymi DOŚWIADCZALNYMI

W celu rozwiązania równań modelowych (1-12) napisano program obliczeniowy w MATLAB-ie. Danymi wejściowymi do obliczeń były natężenia przepływów faz ciekłej i gazowej, stężenie wlotowe CO<sub>2</sub> w gazie oraz stężenie początkowe w fazie ciekłej (równe 0), temperatury gazu i cieczy oraz czas trwania procesu.

Wyniki obliczeń przedstawiono jako profile stężenia CO<sub>2</sub> w cieczy i w gazie wylotowym z absorbera. Stężenie wylotowe CO<sub>2</sub> obliczono przez całkowanie równania (8). Całkowanie prowadzono wykorzystując standardową procedurę MATLAB-a stosowaną do rozwiązywania układów równań różniczkowych nie sztywnych – ode45. Algorytm procedury ode45 bazuje na jawnej metodzie Runge-Kutty (4,5). Obliczenia przeprowadzono przy maksymalnym błędzie względnym i bezwzględnym równym 10<sup>-6</sup>. W każdym kroku całkowania stężenie gazu wylotowego ( $y_{\text{out}}$ ) oraz strumień CO<sub>2</sub> ( $N_{\text{CO}_2}$ ) były obliczane z zależności równości strumieni dyfundującego CO<sub>2</sub> na powierzchni międzyfazowej (równanie 8). Równanie to rozwiązywano wykorzystując wbudowaną funkcję MATLAB-a fsolve z dokładnością do 10<sup>-9</sup>.

Stała absorpcji  $K_a$  była obliczana zgodnie z równaniem (3) na podstawie danych literaturowych równowag rozpuszczania CO<sub>2</sub> w cieczach jonowych [9]. W obliczeniach wartości  $K_a$  zmieniały się w granicach 0,02 do 0,8 dla [Bmim][Ac], 0,03 do 2,5 dla [Emim][Ac].

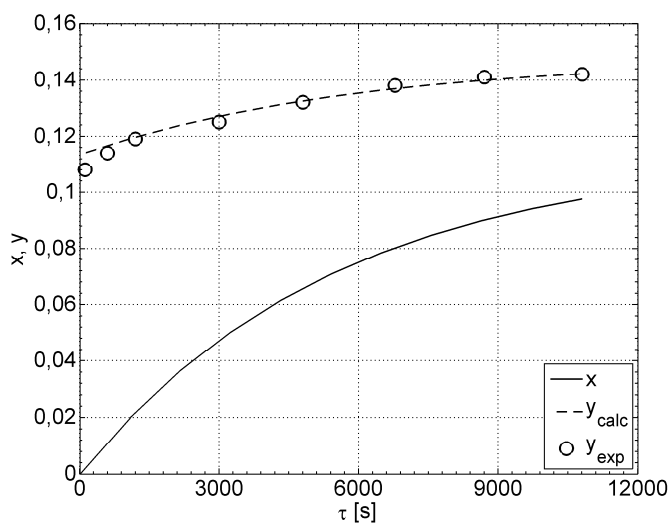
W tabeli 1 przedstawiono parametry fizyczne absorpcji CO<sub>2</sub> w kolumnie wypełnionej. Wszystkie parametry obliczono dla tych samych wartości doświadczalnych: temperatura równa 40°C, współprąd oraz stężenie wlotowe CO<sub>2</sub> równe 15% obj. Dla porównania zamieszczono wartości obliczone dla 15% mas. roztworu MEA.

Tabela 1. Parametry fizyczne procesu absorpcji CO<sub>2</sub> w kolumnie wypełnionej  
Table 1. Physical parameters of CO<sub>2</sub> absorption in packed column

ciecz	$\rho$ kg m <sup>-3</sup>	$\eta \times 10^3$ Pa s	$D_{\text{CO}_2} \times 10^{10}$ m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup>	$k_L \times 10^8$ kmol m <sup>-2</sup> s <sup>-1</sup>	$k_G \times 10^5$ kmol m <sup>-2</sup> s <sup>-1</sup>	$N_{\text{exp}, \tau=0} \times 10^6$ kmol m <sup>-2</sup> s <sup>-1</sup>	s kg/kg
[Emim][Ac]	1025	53,05	4,21	9,90	3,08	0,166	0,053
[Bmim][Ac]	1050	145,3	2,51	6,04	3,08	0,177	0,043
15% MEA	999	0,938	22,4	204	3,08	0,668	0,049

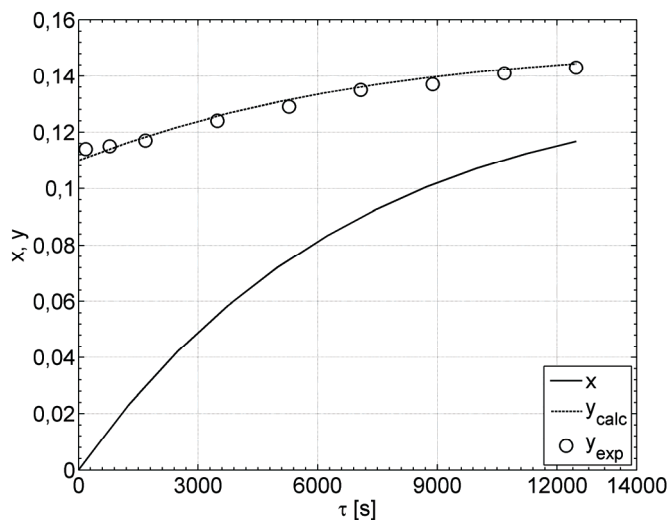
Jak można zauważyć, lepkość cieczy jonowych jest znacząco większa niż roztworu MEA. W związku z powyższym współczynniki dyfuzji oraz współczynniki wnikania masy w fazie ciekłej dla obydwóch cieczy jonowych są znacznie mniejsze niż dla roztworu MEA. Obliczone współczynniki wnikania masy w fazach ciekłej i gazowej wskazują, że główny opór dyfuzyjny jest po stronie ciekłej. Gómez-Coma et al. [6] oraz Luis et al. [8] potwierdzają większy opór wnikania masy w fazie ciekłej w cieczach jonowych. Współczynniki wnikania masy w fazie ciekłej, a także strumień wymiany masy na początku procesu w przypadku cieczy jonowej są wielokrotnie mniejsze niż dla roztworu MEA. Pojemności sorpcyjne  $s$  (masa zaabsorbowanego CO<sub>2</sub>/masę cieczy) w podanych warunkach są porównywalne dla wszystkich cieczy.

Na rysunkach 1 i 2 porównano obliczone wartości stężenia wylotowego CO<sub>2</sub> w fazie gazowej z danymi doświadczalnymi. Dodatkowo przedstawiono obliczony profil stężenia CO<sub>2</sub> w fazie ciekłej. Wykresy przedstawiono dla współprądu, wlotowego stężenia CO<sub>2</sub> równego 15% obj. i temperatury 40°C. Dla obydwóch cieczy jonowych obliczenia są zgodne z wartościami doświadczalnymi. Dla porównania na rys. 3 zamieszczono analogiczny wykres dla absorpcji CO<sub>2</sub> w 15% mas. roztworze MEA.

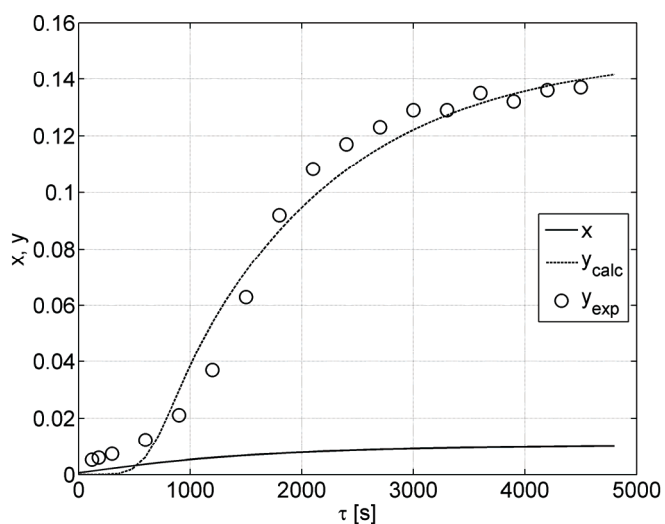


Rys. 1. Profile stężeń CO<sub>2</sub> w gazie i cieczy dla [Bmim][Ac],  $T=40^\circ\text{C}$

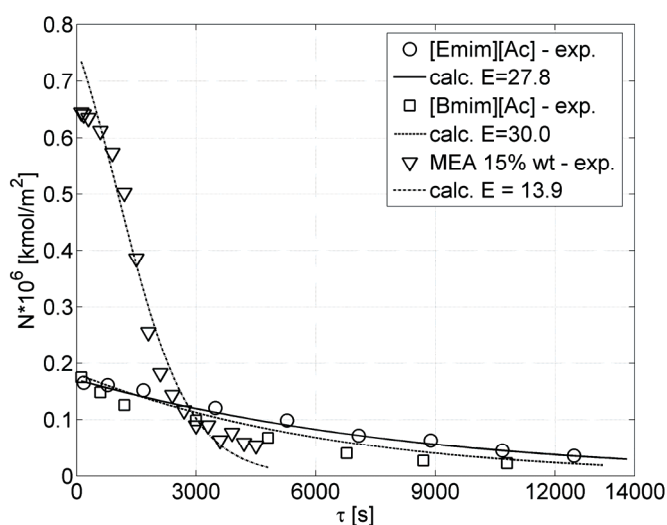
Fig. 1. CO<sub>2</sub> concentration profiles in gas and liquid for [Bmim][Ac],  $T=40^\circ\text{C}$



Rys. 2. Profile stężeń CO<sub>2</sub> w gazie i cieczy dla [Emim][Ac], T=40°C  
 Fig. 2. CO<sub>2</sub> concentration profiles in gas and liquid for [Emim][Ac], T=40°C



Rys. 3. Profile stężeń CO<sub>2</sub> w gazie i cieczy dla 15% mas.. roztworu MEA, T=40°C  
 Fig. 3. CO<sub>2</sub> concentration profiles in gas and liquid for 15% wt. MEA solution, T=40°C



Rys. 4. Porównanie doświadczalnych i obliczeniowych strumieni absorpcji CO<sub>2</sub>, T=40°C

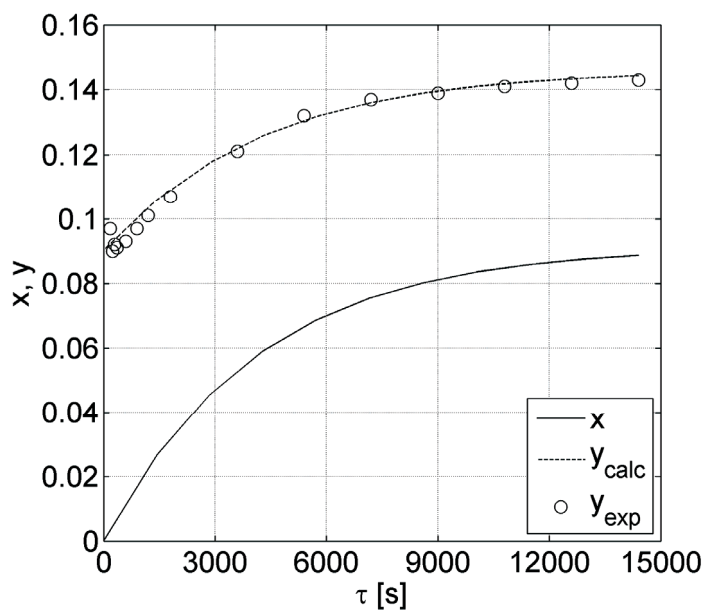
Fig. 4. Comparison of experimental and calculated CO<sub>2</sub> absorption fluxes, T=40°C

Porównanie obliczeniowych i doświadczalnych wartości masowych strumieni absorpcji CO<sub>2</sub> pokazano na rys. 4. Z powodu braku danych literaturowych dotyczących stałych kinetycznych reakcji chemicznej CO<sub>2</sub> z badanymi cieczami jonowymi współczynnik wzmocnienia (E) był estymowany z danych doświadczalnych. Wyestymowane wartości współczynnika wzmocnienia pozwoliły na obliczanie zaabsorbowanych strumieni masowych CO<sub>2</sub> w badanych cieczach jonowych. W celu porównania wyników obliczeniowych analogicznie postąpiono w przypadku pochłaniania CO<sub>2</sub> w roztworze MEA.

Wyznaczone wartości współczynnika wzmocnienia są bliskie wartościom znalezionym w literaturze dla podobnych przypadków, np. Meldon et.al. [14] wyznaczył wartość  $E \cong 20$  dla absorpcji CO<sub>2</sub> w 18,3% mas. roztworze MEA. Gomez-Coma [6] dla absorpcji CO<sub>2</sub> w [Emim][Ac] w temperaturze 45°C, w module membranowym typu hollow-fiber wyznaczył współczynnik wzmocnienia jako równy około 51.

Zarówno obliczone, jak i zmierzone wartości początkowych strumieni masowych absorpcji CO<sub>2</sub> w 15% mas. roztworze MEA są około 4-krotnie większe niż otrzymane dla obydwóch badanych cieczy jonowych. Strumień masowy absorbującego CO<sub>2</sub> w roztworze MEA zmniejsza się szybciej z czasem niż w badanych cieczach jonowych. We wszystkich przypadkach ilości zaabsorbowanego CO<sub>2</sub> były podobne.

Porównanie doświadczalnych i obliczeniowych wartości stężenia wylotowego CO<sub>2</sub> w fazie gazowej dla przypadku zraszania złoża cieczą jonową [Emim][Ac] z 5% dodatkiem wody pokazano na rys. 5.



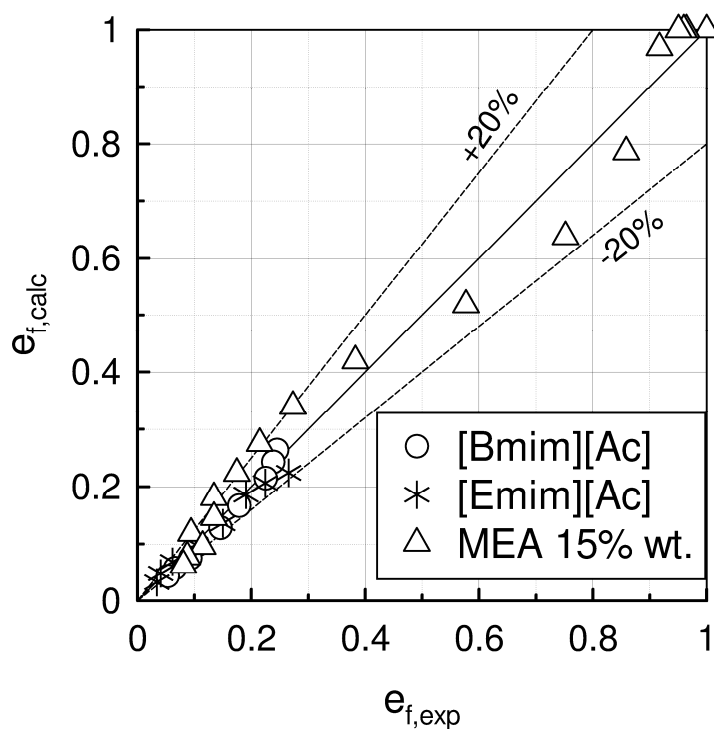
Rys. 5. Profile stężeń  $\text{CO}_2$  w gazie i cieczy dla [Emim][Ac] z 5% mas. dodatkiem wody,  $T=40^\circ\text{C}$

Fig. 5.  $\text{CO}_2$  concentration profiles in gas and liquid for [Emim][Ac] with 5% wt. water content,  $T=40^\circ\text{C}$

Można zauważyć, że w początkowej fazie procesu ( $\tau < 3000$  sek.) uzyskano nieznacznie lepszą sprawność usuwania  $\text{CO}_2$  z gazu dla cieczy jonowej z dodatkiem wody w porównaniu do czystej cieczy jonowej. W późniejszym czasie ( $\tau > 3000$  sek.) wyniki dla czystej cieczy jonowej i z dodatkiem wody są zbliżone.

Na rys. 6 pokazano zgodność obliczonych wartości sprawności usuwania  $\text{CO}_2$  z gazu z doświadczalnymi dla obydwu przebadanych cieczy jonowych i roztworu MEA. Wyniki obliczeń zgadzają się z wynikami doświadczalnymi w granicach  $\pm 20\%$ .





Rys. 6. Porównanie doświadczalnych i obliczonych wartości efektywności usuwania  $\text{CO}_2$

Fig. 6. Comparison of experimental and calculated  $\text{CO}_2$  removal efficiency

### 3. WNIOSKI

- Porównanie wyników doświadczalnych i obliczeniowych uzyskanych według przedstawionego modelu wskazuje, że główny opór dyfuzyjny występuje w fazie ciekłej. Współczynnik wnikania masy w fazie ciekłej oraz początkowy strumień masowy absorpcji  $\text{CO}_2$  w przypadku cieczy jonowych był wielokrotnie niższy niż w przypadku roztworu MEA (Tab. 1).
- Wyniki obliczeń stężenia wylotowego  $\text{CO}_2$  uzyskane według opracowanego modelu matematycznego są zgodne z danymi doświadczalnymi (rys 1,2,5), a różnice między danymi doświadczalnymi a obliczonymi mieszczą się w granicach  $\pm 20\%$  (rys. 6).
- Wyestymowane wartości współczynnika wzmocnienia pozwoliły z dobrą dokładnością obliczyć strumień absorpcji  $\text{CO}_2$  w cieczach jonowych w kolumnie wypełnionej (rys. 4).

### OZNACZENIA – SYMBOLS

A - powierzchnia złoża usypanego,  $\text{m}^2$

- a - area of the packing bed  
powierzchnia właściwa złoża,  $m^2 \cdot m^{-3}$   
specific area of the bed
- C - stężenie CO<sub>2</sub> w gazie  
gas CO<sub>2</sub> concentration
- D - współczynnik dyfuzji,  $m^2 \cdot s^{-1}$   
diffusion coefficient
- d - średnica, m  
diameter
- E - współczynnik wzmocnienia  
enhancement factor
- F - pole przekroju kolumny,  $m^2$   
column cross section area
- G<sub>L</sub> - całkowita masa cieczy, kmol  
total mass of liquid
- Ha - liczba Hatty  
Hatta number
- H - stała Henryego  
Henry's constant
- h - długość kolumny, m  
column length
- k - współczynnik wnikania masy,  $kmol \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$   
mass transfer coefficient
- K<sub>a</sub> - stała absorpcji  
absorption constant
- k<sub>CF</sub> - stała szybkości reakcji,  $kmol^{-1} \cdot s^{-1}$   
reaction rate constant
- K<sub>ov</sub> - całkowity współczynnik transportu masy,  $kmol \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$   
overall mass transfer coefficient
- L - wysokość złoża, m  
bed height
- N<sub>CO2</sub> - strumień absorpcji CO<sub>2</sub>,  $kmol \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$   
CO<sub>2</sub> absorption flux
- r - szybkość reakcji,  $kmol \cdot s^{-1}$   
reaction rate
- Re - liczba Reynoldsa  
Reynolds number
- s - pojemność sorpcyjna  
sorption capacity
- Sc - liczba Schmidta  
Schmidt number
- Sh - liczba Sherwooda  
Sherwood number

- T - temperatura, °C  
temperature
- V - natężenie przepływu, kmol·s<sup>-1</sup>  
flow rate
- x - udział molowy w fazie ciekłej  
mol fraction in liquid phase
- y - udział molowy w fazie gazowej  
mol fraction in gas phase

## LITERY GRECKIE – GREEK LETTERS

- ε - porowatość złoża  
bed porosity
- Δπ - moduł napędowy ruchu masy  
mass transfer driving force
- η - lepkość, Pa·s  
viscosity
- ρ - gęstość molowa, kmol·m<sup>-3</sup>  
molar density
- τ - czas, s  
time
- ϑ<sub>z</sub> - długość zastępcza, m  
equivalent length

## INDEKSY DOLNE - SUBSCRIPTS

- CO<sub>2</sub>- dwutlenek węgla  
carbon dioxide
- col - kolumna  
column
- G - gaz  
gas
- i - inert  
inert
- in - wlot do kolumny  
column inlet
- L - ciecz  
liquid
- m - wartość średnia na drodze dyfuzji  
mean value along diffusion path
- out - wylot z kolumny  
column outlet
- r - pierścień Raschiga

## Raschig ring

## INDEKSY GÓRNE - SUPERSSCRIPTS

- \* - stan równowagi  
equilibrium state
- - wartość średnia między wlotem i wylotem z kolumny  
mean value between inlet and outlet of the column

## PIŚMIENNICTWO CYTOWANE - REFERENCES

- [1] Blatha J., Deublerb N., Hirtha T., Schiestelb T., 2012. Chemisorption of carbon dioxide in imidazolium based ionic liquids with carboxylic anions, *Chem. Eng. J.* 181–182, 152–158.
- [2] Maginn E.J., 2005. Design and Evaluation of Ionic Liquids as Novel CO<sub>2</sub> Absorbents, University of Notre Dame, Notre Dame, IN 46556..
- [3] Shiflett M.B., Kasprzak D.J., Junk C.P., Yokozeki A., 2008. Phase behavior of (carbon dioxide+[Bmim][Ac]) mixtures, *J. Chem. Thermodynamics*, 40, 25–31.
- [4] Cabaco M.I., Besnard M., Danten Y., Coutinho J.A.P., 2012. Carbon dioxide in 1-butyl-3-methylimidazolium acetate. I. Unusual solubility investigated by Raman spectroscopy and DFT calculations, *J. Phys. Chem. A.*, 116, 1605–1620.
- [5] Galan-Sanchez L.M., Meindersma G.W., de Haan A.B., 2011. Kinetics of absorption of CO<sub>2</sub> in amino-functionalized ionic liquids, *Chem. Eng. J.*, 166, 1104–1115.
- [6] Gómez-Coma L., Garea A., Irabien A., 2014. Non-dispersive absorption of CO<sub>2</sub> in [emim][EtSO<sub>4</sub>] and [emim][Ac]: Temperature influence, *Sep. Purif. Technol.*, 132, 120–125.
- [7] Shulman H.L., Ulrich C.F., Proulx A.Z., Zimmerman J.O., 1955. Performance of packed columns: II Wetted and effective-interfacial areas, gas-and liquid-phase mass transfer rates, *AIChE J.*, 1, 253–258.
- [8] Luis P., Garea A., Irabien A., 2009. Zero solvent emission process for sulfur dioxide recovery using a membrane contactor and ionic liquids, *J. Membr. Sci.*, 330, 80–89.
- [9] DeCoursey W.J., 1982. Enhancement factors for gas absorption with reversible reaction, *Chem. Eng. Sci.*, 37, 1483–1489.
- [10] Shiflett M.B., Yokozeki A., 2009. Phase behavior of carbon dioxide in ionic liquids: [EMIM] [Acetate], [EMIM] [Trifluoroacetate], and [EMIM] [Acetate] + [EMIM] [Trifluoroacetate] mixtures, *J. Chem. Eng. Data*, 54, 108–114.
- [11] Sherwood T.K., Pigford R.L., 1952. Absorption and extraction, McGraw-Hill, New York.
- [12] Morgan D., Ferguson L., Scovazzo P., 2005. Diffusivities of gases in room-temperature ionic liquids: data and correlation obtained using a lag-time technique, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 44, 4815–4823.
- [13] Bird R.B., Stewart W.E., Lightfoot E.N., 2002. Transport phenomena, second ed., Jon Wiley & Sons Inc., New York.
- [14] Meldon J.H., Morales-Cabrera A.A., 2011. Analysis of carbon dioxide absorption in and stripping from monoethanolamine, *Chem. Eng. J.*, 171, 753–759.

ADAM ROTKEGEL, ZENON ZIOBROWSKI,

## ABSORPTION OF CARBON DIOXIDE IN COLUMN SPRAYED WITH IONIC LIQUID. PART II – MATHEMATICAL MODEL AND CALCULATION RESULTS

The mathematical model of carbon dioxide removal from gases in packed bed column sprayed with ionic liquid was presented. Calculations were performed for column sprinkled with ionic liquids [Emim][Ac] and [Bmim][Ac] in temperature range 20-60°C, for cocurrent flow of gas and liquid phase.

The influence of mass transfer resistances, initial CO<sub>2</sub> concentration, absorption temperature and 2, 5, 10% wt. water addition on CO<sub>2</sub> removal efficiency was investigated.

The resistance in series model and estimated values of enhancement factor were used to predict with good accuracy: mass fluxes of absorbed carbon dioxide for both ILs (Fig. 4) and CO<sub>2</sub> concentration in gases leaving column (Fig. 1-3). The CO<sub>2</sub> absorption efficiency in packed column depends on temperature and initial CO<sub>2</sub> concentration.

The calculation results shows that main mass transfer resistance in the process of CO<sub>2</sub> absorption in packed column is in the liquid phase for both investigated ILs. The mass transfer resistance in gas phase can be neglected (Table 1).

The addition of small amounts of water to [Emim][Ac] (5%) slightly increases CO<sub>2</sub> absorption rates (especially in the first period of time  $\tau < 3000$ s), while equilibrium absorption capacity does not change.

*Received: 2.09.2016 r.*

*Accepted: 20.10.2016 r.*