Multi-scale approach for the electrochemical conversion of carbon dioxide to value-added products

Publieke samenvatting / Public summary

Samenvatting

Duurzame elektriciteit uit wind- en zonne-energie kan worden ingezet om koolstofdioxide (CO2) om te zetten naar waardevolle chemicaliën op basis van een reactie van CO2 en bijvoorbeeld water (H2O). Verschillende vormen van elektrificatie zijn belangrijk om de energiesector en de petrochemische industrie te helpen over te schakelen van koolstofverbindingen uit fossiele brandstoffen naar processen gebaseerd op duurzame energie. Hiervoor zijn verschillende processen en reactoren nodig die de omzetting van CO2 op industriële schaal op een kosten- en energie-efficiënte manier mogelijk maken. Het is belangrijk dat er een koppeling komt tussen de fluctuerende energiebronnen zon- en windenergie en de verschillende toepassingen.

De belangrijkste doelstelling is om een zogenaamd 'multi-scale' beschrijving te ontwikkelen voor de elektrochemische omzetting van kooldioxide. De processen op moleculair en reactor-niveau zijn met verschillende modellen beschreven. Op basis van een beperkte extrapolatie van de huidige data naar toekomstige parameters, en dan vooral voor een verdubbeling van de stroomdichtheid op de kathode, blijkt mierenzuur kosteffectief gemaakt te kunnen worden uit CO2. Er is met het project een duidelijk stap gezet in het beter begrijpen van de elektrochemische omzetting van CO2 met water

Projectinformatie / Project information

Projectnummer / Project number
TKITOECATO2-T2014-21
Subsidiebedrag / Grant amount
€ 50.000,00

Algemene informatie / General information

Penvoerder / Secretariat
TNO

Volg Topsector Energie op X / Follow Topsector Energie on X

@TSEnergie

naar mierenzuur.

Projectdoelstelling

Het project is een samenwerking tussen een bedrijf en een kennisinstituut met als doel een proces te ontwikkelen, te modelleren, en een elektrochemische reactor te ontwerpen waarbij CO2 wordt omgezet naar waardevolle chemicaliën. Hierbij wordt kooldioxide dat is afgevangen bij een industriële bron via een elektrochemisch proces omgezet, waarbij de benodigde energie en meer specifiek de elektriciteit word geleverd door een hernieuwbare energiebron, zoals zonne-energie.

Projectbeschrijving

Voor elk van de mogelijke productieprocessen is een specifieke numerieke methode het meest geschikt. Met moleculaire simulaties en toestandsvergelijkingen kunnen de interacties tussen de ionen en de moleculen in de elektrolytoplossing en het vaste kathode-oppervlak worden beschreven. Daarnaast kan met een eindige-elementen methode de differentiaal vergelijkingen voor transport en reactie in de reactor worden beschreven. Als modelcomponent is mierenzuur (HCOOH) gebruikt, mierenzuur is het eenvoudigste molecuul dat uit water en CO2 kan worden gemaakt: 2 CO2 + 2 H2O = 2 HCOOH + O2

Resultaten

Er is er een vergelijking gemaakt tussen experimentele resultaten en resultaten verkregen met de toestands-vergelijking voor het damp-vloeistof evenwicht voor mengsel van CO2-water-HCOOH. Verschillende aspecten zijn beschreven, o.a. het effect van druk en pH op de oplosbaarheid van CO2 in mengsels van water en mierenzuur. Ook is de dichtheid en pH van het water-mierenzuur systeem bepaald. Er is een uitgebreide beschrijving gegeven van het water-CO2-evenwicht als functie van de pH en druk. De verdeling van carbonzuur (CO2 + H2O, H2CO3), carbonaat (CO3-) en bicarbonaat (CO32-) is bepaald als functie van de pH en voor verschillende drukken.

Er is een uitgebreide numerieke beschrijving gegeven van de elektrochemische omzetting van CO2 bij hoge druk. De vergelijkingen voor de diffusie in een elektrochemische cel met de reacties op de kathode zijn numeriek opgelost. De hoeveelheid mierenzuur kan op deze manier worden uitgerekend, waarbij verschillende parameters kunnen worden gevarieerd, zoals de elektrische potentiaal, de stroomsterkte, en de CO2-druk in de reactor. De resultaten verkregen met het numerieke model zijn vergeleken met experimentele data en laten een redelijk goede overeenstemming zien. De hoge Faraday efficiency naar mierenzuur van boven de 90% bij verhoogde CO2 druk, in de range van 20 tot 40 bar, wordt door het model goed beschreven.

En er is een economische evaluatie opgesteld voor een proces waarbij CO2 wordt omgezet naar mierenzuur en waarbij gebruik wordt gemaakt van hernieuwbare elektriciteit. Op basis van een beperkte extrapolatie van de huidige data naar toekomstige parameters, en dan vooral voor een verdubbeling van de stroomdichtheid op de kathode, blijkt mierenzuur kosteffectief gemaakt te kunnen worden uit CO2.

De data in deze applicatie is afkomstig van de Rijksdienst voor Ondernemend Nederland (RVO) en wordt in samenwerking met de Topsector Energie ontsloten.
Voor meer informatie over de Topsector Energie, ga naar **www.topsectorenergie.nl**.

Voor meer informatie over de TSE / Energie-Innovatie regelingen die RVO aanbiedt, ga naar **www.rvo.nl/tse**.