

Analisi dei dati per esperimenti di produzione fotocatalitica di H₂

Premessa

Vi viene fornito un file Excel che riporta tutti i dati relativi alle condizioni sperimentali e l'area del picco di H₂ in funzione del tempo di irraggiamento. Ci sono due fogli di dati: nel primo foglio vengono forniti i dati per diversi metalli alla stessa carica metallica (0.2 wt%) mentre nel secondo foglio vengono forniti i dati per due diverse cariche metalliche di Pt (0.2 e 2.0 wt%).

Analisi dei dati

1. Conversione dell'area in concentrazione

L'area del picco di H₂ è proporzionale alla concentrazione di H₂ nel flusso di gas. I valori di area vanno quindi convertiti per ottenere la concentrazione di H₂ registrata nell'istante in cui viene effettuato il campionamento (iniezione) della fase gassosa in uscita dal reattore. In particolare, il Responsive Factor RF che viene fornito mette in relazione l'area del picco con la percentuale in volume di H₂ nel flusso di gas:

$$\text{AREA} = \text{RF} \times \% \text{H}_2$$

2. Calcolo della velocità di produzione di H₂

Nota la %H₂ per ogni iniezione, è possibile calcolare il flusso di H₂ in uscita dal flusso totale di gas (in prima approssimazione, pari al flusso di gas inerte in quanto %H₂ sarà molto molto bassa). Il flusso di H₂ può essere poi convertito in $\mu\text{mol h}^{-1}$ considerando il gas come un gas ideale ed infine normalizzato rispetto alla massa del catalizzatore.

Il risultato rappresenta la velocità di produzione di H₂, espressa in $\mu\text{mol g cat}^{-1} \text{h}^{-1}$. Presentare i dati riportando la velocità di produzione in funzione del tempo di irraggiamento.

3. Calcolo della conversione di etanolo

Integrando nel tempo il flusso di H₂ prodotto, è possibile ottenere la quantità totale di H₂ prodotto dall'esperimento e, da questa, la conversione dell'etanolo. Per il calcolo, assumere che la densità della soluzione di etanolo al 96% in volume è pari a 0.805 g/mL.

4. Calcolo della Light-to-Fuel Efficiency (LFE) e della Apparent Quantum Yield (AQY)

Facendo riferimento alle slides presentate a lezione, calcolare la LFE dalla produzione di H₂ sotto irraggiamento con luce solare simulata e la AQY durante l'irraggiamento con luce monocromatica a 350 nm. Per i calcoli tenere in considerazione queste condizioni:

- Area irraggiata di diametro 35 mm.
- Potenza con luce solare simulata: UV 330 W/m²; VIS 1600 W/m².
- Potenza con luce monocromatica a 350 nm: 23 W/m².

Relazione

Nella relazione, riportare:

- Il grafico relativo alla velocità di produzione di H₂.
- Tutti i calcoli effettuati ed i risultati degli altri parametri richiesti (conversione di etanolo, LFE e AQY).

Domande

1. Analizzando quantitativamente la velocità di produzione di H₂, spiegare perché la fase iniziale mostra una rapida ascesa della curva. Cosa avviene nella fase successiva? Si osserva qualche genere di disattivazione?
2. Confrontando l'attività catalitica dei fotocatalizzatori con la stessa carica di co-catalizzatore (in termini di massima velocità di produzione di H₂ e di AQY) è possibile osservare come questa dipenda dalla natura chimica del metallo utilizzato. Giustificare i risultati ottenuti.
3. Confrontando l'attività catalitica dei fotocatalizzatori con diversa carica di Pt (in termini di massima velocità di produzione di H₂ e di AQY), giustificare l'effetto della carica di Pt sulle prestazioni fotocatalitiche.
4. Ovviamente, la condizione ottimale per il funzionamento di un fotocatalizzatore è che esso abbia una LFE del 100%. Ipotizzare quali possano essere le ragioni per cui il valore sperimentale è in realtà molto più basso.