



**Politecnico  
di Torino**

POLITECNICO DI TORINO

**Corso di Laurea Magistrale in Ingegneria Meccanica**

a.a. 2021/2022

Sessione di Laurea marzo/aprile 2022

**ANALISI SPERIMENTALE E NUMERICA DI UN COATING  
ADSORBENTE PER IL CONTROLLO DELL'UMIDITÀ RELATIVA**

**Relatori:**

Prof. Marco Simonetti

Prof. Marco Carlo Masoero

Ing. Vincenzo Maria Gentile

**Candidato:**

Edoardo Buzzi s275646



## ABSTRACT

Secondo le previsioni attuali, entro il 2050 si verificherà un significativo aumento demografico globale e una rapida urbanizzazione anche di luoghi della Terra caratterizzati da climi caldi e umidi. Ad oggi la refrigerazione è responsabile per il 40 ÷ 60 % dei picchi di consumo elettrico in molte città; nell'Unione europea il settore edilizio è causa del 40 % dei consumi finali di energia e del 36 % delle emissioni totali di anidride carbonica. Questo trend pone un serio ostacolo agli obiettivi stabiliti nell'Accordo di Parigi per limitare in particolare l'aumento del riscaldamento globale a 2 °C rispetto ai livelli preindustriali.

In quest'ottica, all'interno del progetto europeo *Horizon 2020 RE-COGNITION*, che si incentra sullo sviluppo di tecnologie che abilitino il maggior uso possibile di fonti rinnovabili negli edifici, è stato dedicato un task allo studio di nuovi sistemi di raffrescamento/climatizzazione estiva. L'obiettivo finale è quello di ottenere edifici a energia zero, o meglio ancora, edifici a energia positiva.

Il lavoro di questa tesi è volto allo studio di un sistema ibrido di climatizzazione ambientale basato sull'utilizzo ibrido di energia solare, tramite l'uso di silica gel per il controllo dell'umidità relativa. Il sistema sfrutta uno scambiatore di calore alettato su cui viene eseguito un trattamento di coating per aumentare le superfici di scambio in gioco, rispetto ad altre configurazioni scambiatore – materiale adsorbente. Facendo attraversare lo scambiatore da un flusso d'aria umida, il materiale adsorbente si carica di vapore acqueo e deumidifica l'aria. Una volta terminato il processo di adsorbimento e di accumulo d'acqua nel materiale, è necessario rigenerare il silica gel per poterlo riutilizzare. Questo si ottiene aumentando la temperatura dello scambiatore per mezzo di fonti di calore di tipo rinnovabile oppure calore di scarto. Inserendo in parallelo due scambiatori uguali, alternandone il funzionamento in adsorbimento e in rigenerazione, è possibile far funzionare senza interruzione il sistema, garantendo continuità di servizio e portando a risparmi energetici rispetto ad un sistema di refrigerazione tradizionale.

Nella tesi, dopo una breve trattazione iniziale sui materiali adsorbenti, viene eseguita, supportata da un'analisi sperimentale, la caratterizzazione del silica gel in polvere che si utilizza nel sistema – in parallelo l'analisi viene svolta anche su silica gel in sfere per compararne i risultati. Viene dunque proposta una modellizzazione teorica del comportamento adsorbente del materiale, sia nella fase di deumidificazione sia in quella di rigenerazione. Il modello utilizzato, basato su un approccio di Linear Driving Force (LDF) è stato opportunamente calibrato e corretto con i risultati sperimentali. Successivamente è stata sviluppata una tecnica di coating della polvere di silica gel su superfici lisce in alluminio, in seguito utilizzate come alette di uno scambiatore di calore. Il gel di silice viene disperso come seconda fase in una matrice di polidimetilsilossano (PDMS) che conferisce al coating caratteristiche strutturali. In maniera analoga a quanto fatto in precedenza con la polvere di silica gel, la capacità adsorbente del coating viene testata in termini sia sperimentali sia modellistici.

## INDICE

INDICE DELLE FIGURE .....	VII
INDICE DELLE TABELLE.....	XI
NOMENCLATURA.....	XIII
<b>1</b> INTRODUZIONE .....	<b>1</b>
<b>2</b> ADSORBIMENTO .....	<b>7</b>
2.1 <i>Introduzione</i> .....	7
2.2 <i>Isotherme di adsorbimento</i> .....	9
2.3 <i>Adsorbimento monolayer e multilayer</i> .....	10
2.3.1 Modello di Langmuir .....	11
2.3.2 Modello BET .....	11
2.4 <i>Meccanismi di diffusione in mezzi porosi</i> .....	12
2.4.1 Diffusione molecolare .....	12
2.4.2 Diffusione di Knudsen.....	13
2.4.3 Diffusione superficiale .....	13
2.4.4 Diffusione complessiva.....	13
2.5 <i>Materiali adsorbenti</i> .....	14
2.6 <i>Analisi e confronto materiali</i> .....	16
2.6.1 Silica gel .....	21
2.6.1.1 Diffusione nel gel di silice.....	23
2.6.2 Zeoliti e Carboni attivi .....	23
2.6.3 Alluminofosfati, Aerogel, Cellulosa, Idrogel .....	25
2.6.4 MOF .....	27
2.7 <i>Considerazioni conclusive</i> .....	29
<b>3</b> CARATTERIZZAZIONE DEL MATERIALE .....	<b>32</b>
3.1 <i>Procedura seguita</i> .....	32
3.1.1 Strumenti di analisi.....	33

3.2	<i>Test di adsorbimento</i> .....	35
3.2.1	Procedura del test .....	35
3.2.2	Barra di errore .....	35
3.2.3	Risultati ottenuti.....	36
3.3	<i>Test di desorbimento</i> .....	40
3.3.1	Procedura del test .....	40
3.3.2	Barra di errore .....	40
3.3.3	Risultati ottenuti.....	41
4	MODELLAZIONE DEL MATERIALE .....	47
4.1	<i>Scelta del modello</i> .....	47
4.2	<i>Sensibilità del modello</i> .....	50
4.3	<i>Simulazione curve di adsorbimento del silica gel</i> .....	56
5	COATING .....	60
5.1	<i>Ricetta del coating</i> .....	60
5.2	<i>Test adsorbimento e rigenerazione del coating</i> .....	64
5.3	<i>Modellazione del comportamento del coating</i> .....	67
5.3.1	Simulazione curve del water uptake del coating .....	73
6	CONCLUSIONE .....	75
	BIBLIOGRAFIA .....	77
	APPENDICE.....	84
	A.1. <i>Datasheet termobilancia Kern DBS 60-3</i> .....	84
	A.2. <i>Datasheet bilancia Kern KB 360-3N</i> .....	85
	A.3. <i>Test di adsorbimento dei materiali: dati sperimentali e modellazione</i> .....	87
	A.4. <i>Test di desorbimento dei materiali: dati sperimentali e modellazione</i> .....	95
	A.5. <i>Curve desorbimento e adsorbimento + umidità relativa dei materiali</i> .....	114
	A.6. <i>Script MATLAB, simulazione curve di adsorbimento e desorbimento</i> .....	122
	A.7. <i>Safety data sheets dei materiali utilizzati nel coating</i> .....	126
	Polymethylhydrosiloxane, trimethylsilyl terminated (RJ 202) .....	126

Silanol terminated polydimethylsiloxane (RJ 107) .....	132
Bis(neodecanoate)tin, tech-90 (catalizzatore T9) .....	139

## INDICE DELLE FIGURE

Figura 1.1: Domanda di raffreddamento rispetto all'attuale proprietà di sistemi di condizionamento in diversi paesi [1] .....	1
Figura 1.2: Consumi energetici ed emissioni globali del settore edilizio nel 2019 [2] .....	2
Figura 1.3: Schema funzionale di una ruota essiccante [8] .....	4
Figura 1.4: Schema funzionale di letti adsorbenti in parallelo [8] .....	5
Figura 2.1: Potenziale di Lennard-Jones; sono stati utilizzati a titolo esemplificativo i valori di $\epsilon = 1$ kJ/mol e $\sigma = 0,1$ nm .....	8
Figura 2.2: Isotherme di adsorbimento IUPAC [15] .....	10
Figura 2.3: Esempi di componenti di materiali adsorbenti compositi [21] .....	15
Figura 2.4: Categorie materiali adsorbenti compositi .....	16
Figura 2.5: Curve isoterme del silica gel RD ( $q/q_m$ indica la quantità adsorbita $q$ rispetto al valore di equilibrio $q_m$ ) [31] .....	21
Figura 2.6: Water uptake di gel di silice .....	22
Figura 2.7: Water uptake di zeoliti e carboni attivi .....	25
Figura 2.8: Isotherme di adsorbimento per alcuni aerogel a 20 °C [14] .....	26
Figura 2.9: Water uptake di alluminofosfati, aerogel, cellulosa e idrogel .....	27
Figura 2.10: Water uptake di MOF .....	28
Figura 2.11: Confronto tra alcuni materiali adsorbenti a 20 °C e 70 % RH .....	29
Figura 2.12: Analisi del water uptake in funzione della temperatura di rigenerazione [14] ...	30
Figura 3.1: Campione silica gel in polvere .....	32
Figura 3.2: Campione silica gel in sfere .....	32
Figura 3.3: Termobilancia Kern DBS 60-3 .....	33
Figura 3.4: Box a diverse condizioni di umidità relativa .....	34
Figura 3.5: Bilancia Kern KB 360-3N .....	34

Figura 3.6: Curva adsorbimento silica gel in sfere, RH equilibrio 32 %, T ambiente 21°C, T desorbimento precedente 180 °C.....	36
Figura 3.7: Curva adsorbimento silica gel in polvere, RH equilibrio 43 %, T ambiente 21°C, T desorbimento precedente 60 °C.....	37
Figura 3.8: Curva adsorbimento silica gel in sfere, RH equilibrio 70%, T ambiente 21 °C, T desorbimento precedente 60 °C.....	37
Figura 3.9: Curva adsorbimento silica gel in polvere, RH equilibrio 92 %, T ambiente 21 °C, T desorbimento precedente 120 °C.....	37
Figura 3.10: Test desorbimento polvere, T rigenerazione 100 °C per 2h, RH di equilibrio iniziale 43 % .....	41
Figura 3.11: Test desorbimento sfere, T rigenerazione 80 °C per 2h, RH di equilibrio iniziale 70 % .....	42
Figura 3.12: Test desorbimento polvere, T rigenerazione 60 °C per 2h, RH di equilibrio iniziale 92 % .....	42
Figura 3.13: Desorbimento SG in polvere a diverse T di rigenerazione, water uptake iniziale raggiunto in equilibrio a RH 32 % .....	43
Figura 3.14: Desorbimento SG in polvere a diverse T di rigenerazione, water uptake iniziale raggiunto in equilibrio a RH 43 % .....	43
Figura 3.15: Desorbimento SG in polvere a diverse T di rigenerazione, water uptake iniziale raggiunto in equilibrio a RH 70 % .....	43
Figura 3.16: Desorbimento SG in polvere a diverse T di rigenerazione, water uptake iniziale raggiunto in equilibrio a RH 92 % .....	44
Figura 3.17: Desorbimento SG in sfere a diverse T di rigenerazione, water uptake iniziale raggiunto in equilibrio a RH 32 % .....	44
Figura 3.18: Desorbimento SG in sfere a diverse T di rigenerazione, water uptake iniziale raggiunto in equilibrio a RH 43 % .....	44
Figura 3.19: Desorbimento SG in sfere a diverse T di rigenerazione, water uptake iniziale raggiunto in equilibrio a RH 70 % .....	45
Figura 3.20: Desorbimento SG in sfere a diverse T di rigenerazione, water uptake iniziale raggiunto in equilibrio a RH 92 % .....	45
Figura 4.1: Dati sperimentali, modelli - Validazione modello .....	48

Figura 4.2: Curva desorbimento + adsorbimento per silica gel in polvere: desorbimento per 2 h a 60 °C e adsorbimento in ambiente a T = 21°C e RH = 70 % per 4 h, confronto dati sperimentali e modello; Curva umidità relativa: andamento dell'RH dell'ambiente di lavoro controllato durante la fase di adsorbimento, l'RH tende al valore di equilibrio (70 %) all'aumentare del tempo trascorso .....	50
Figura 4.3: Caso standard iniziale per l'analisi parametrica di sensibilità.....	51
Figura 4.4: Analisi sensibilità parametro $F_0$ .....	52
Figura 4.5: Analisi sensibilità parametro $D_{S0}$ .....	52
Figura 4.6: Analisi sensibilità parametro $T_{d/a}$ .....	53
Figura 4.7: Analisi sensibilità parametro $E_a$ .....	54
Figura 4.8: Analisi sensibilità parametro $R_p$ .....	55
Figura 4.9: Analisi sensibilità parametro $m$ .....	55
Figura 4.10: Modello $D_s$ per SG in polvere .....	58
Figura 4.11: Modello $D_s$ per SG in sfere .....	58
Figura 4.12: Esempio simulazione curva desorbimento e adsorbimento per silica gel .....	59
Figura 5.1: Composto senza un'adeguata quantità di etanolo .....	61
Figura 5.2: Composto pronto per il percolamento.....	61
Figura 5.3: Catalizzatore disciolto in etanolo .....	62
Figura 5.4: Alcuni campioni attenuati (I) .....	63
Figura 5.5: Alcuni campioni ottenuti (II).....	63
Figura 5.6: Adsorbimento e rigenerazione del coating al variare dell'umidità relativa dell'ambiente di adsorbimento .....	65
Figura 5.7: Confronto tra $w_{t1}$ , $w_{t2}$ e $w_{t3}$ per un campione durante un adsorbimento di 4 h in un ambiente con RH di equilibrio pari al 92 % .....	66
Figura 5.8: Adsorbimento del coating per 4 h a 21 °C e RH di equilibrio 32 % .....	68
Figura 5.9: Adsorbimento del coating per 4 h a 21 °C e RH di equilibrio 43 % .....	69
Figura 5.10: Adsorbimento del coating per 4 h a 21 °C e RH di equilibrio 70 % .....	69
Figura 5.11: Adsorbimento del coating per 4 h a 21 °C e RH di equilibrio 92 % .....	69

Figura 5.12: Desorbimento del coating per 1 h a 80 °C e water uptake iniziale raggiunto in equilibrio a RH 32 %.....	70
Figura 5.13: Desorbimento del coating per 1 h a 80 °C e water uptake iniziale raggiunto in equilibrio a RH 43 %.....	70
Figura 5.14: Desorbimento del coating per 1 h a 80 °C e water uptake iniziale raggiunto in equilibrio a RH 70 %.....	70
Figura 5.15: Desorbimento del coating per 1 h a 80 °C e water uptake iniziale raggiunto in equilibrio a RH 92 %.....	71
Figura 5.16: Desorbimento 1 h a 80 °C e adsorbimento 4 h a 21 °C, dati sperimentali e modello - Curva umidità relativa in adsorbimento con $RH^* = 32\%$ .....	71
Figura 5.17: Desorbimento 1 h a 80 °C e adsorbimento 4 h a 21 °C, dati sperimentali e modello - Curva umidità relativa in adsorbimento con $RH^* = 43\%$ .....	72
Figura 5.18: Desorbimento 1 h a 80 °C e adsorbimento 4 h a 21 °C, dati sperimentali e modello - Curva umidità relativa in adsorbimento con $RH^* = 70\%$ .....	72
Figura 5.19: Desorbimento 1 h a 80 °C e adsorbimento 4 h a 21 °C, dati sperimentali e modello - Curva umidità relativa in adsorbimento con $RH^* = 92\%$ .....	72
Figura 5.20: Modello $D_s$ per coating SG .....	73
Figura 5.21: Esempio simulazione curva desorbimento e adsorbimento per coating di silica gel.....	74

## INDICE DELLE TABELLE

Tabella 2.1: Caratteristiche materiali adsorbenti. Sono indicati in tabella: la matrice del materiale (Base), il nome del materiale ed eventuali elementi aggiunti (Material composition), la temperatura (T), l'umidità relativa (RH), la pressione di vapore (Pv) a cui sono effettuate le misure, la capacità di adsorbimento rilevata (W), la temperatura di rigenerazione del materiale (T <sub>reg</sub> ), l'area superficiale (Surf area), il volume dei pori (Pore vol) e sono elencati i codici dei simboli di pericolo (Hazard symbols); nella prima colonna a sinistra sono inseriti i riferimenti bibliografici .....	18
Tabella 2.2: Valori tabellari della pressione di saturazione del vapore acqueo in funzione della temperatura .....	19
Tabella 2.3: Simboli di pericolo, la scala varia da (1) meno grave a (4) più grave .....	19
Tabella 2.4: Sigle e abbreviazioni della Tabella 2.1 .....	20
Tabella 2.5: Valori di E <sub>a</sub> e D <sub>50</sub> per silica gel .....	23
Tabella 3.1: Curve di adsorbimento di silica gel in polvere e in sfere con temperatura ambiente di 21 °C; in tutti i grafici la curva rossa fa riferimento al desorbimento precedente eseguito a 180 °C, quella gialla a 120 °C e quella azzurra a 60 °C.....	39
Tabella 3.2: Condizioni di water uptake all'equilibrio per una temperatura di test di 21 °C in adsorbimento.....	39
Tabella 3.3: Condizioni di water uptake iniziali in funzione di materiale, umidità relativa e temperatura di rigenerazione precedente all'adsorbimento.....	39
Tabella 3.4: Condizioni di water uptake iniziale in desorbimento .....	45
Tabella 3.5: Condizioni di water uptake all'equilibrio, dopo una rigenerazione di 2h a diverse temperature e diversi water uptake iniziali.....	46
Tabella 4.1: Valori coefficiente m.....	57
Tabella 4.2: Parametri modello di Arrhenius per SG.....	58
Tabella 5.1: Confronto water uptake all'equilibrio tra silica gel in polvere e coating con massa secca valutata a 80 °C .....	66
Tabella 5.2: Percentuale in peso effettiva dei componenti del coating.....	67

---

Tabella 5.3: Caratteristiche del coating analizzato.....	67
Tabella 5.4: Valori coefficiente m per coating SG .....	73
Tabella 5.5: Parametri modello di Arrhenius per il coating .....	73

## NOMENCLATURA

AC	Carboni attivi	-
AE	Aerogel	-
AlPO	Alluminofosfati	-
Cel	Cellulosa	-
Hyd	Idrogel	-
MOF	Metal-Organic Framework	-
PDMS	Polidimetilsilossano	-
SG	Gel di silice	-
Ze	Zeoliti	-
$D$	Diffusione complessiva	$[m^2 \cdot s^{-1}]$
$D_K$	Diffusione di Knudsen	$[m^2 \cdot s^{-1}]$
$D_p$	Diffusione dei pori	$[m^2 \cdot s^{-1}]$
$D_s$	Diffusione superficiale	$[m^2 \cdot s^{-1}]$
$D_{S0}$	Costante pre-esponenziale della diffusione superficiale	$[m^2 \cdot s^{-1}]$
$D_m$	Diffusione molecolare	$[m^2 \cdot s^{-1}]$
$E_1$	Energia adsorbimento primo layer	$[J \cdot mol^{-1}]$
$E_L$	Energia adsorbimento secondo layer e successivi	$[J \cdot mol^{-1}]$
$E_a$	Energia di attivazione	$[J \cdot mol^{-1}]$
$F_0$	Fattore geometrico correttivo	$[-]$
$K_{eq}$	Costante di adsorbimento all'equilibrio	$[m^3 \cdot kg^{-1}]$
$M$	Massa molare	$[g \cdot mol^{-1}]$
$RH$	Umidità relativa	$[\%]$
$R_p$	Raggio medio particella	$[m]$
$R_u$	Costante universale dei gas	$[J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}]$
$T$	Temperatura	$[^{\circ}C]$
$T_{sat}$	Temperatura di saturazione	$[^{\circ}C]$
$W$	Capacità di adsorbimento di acqua all'equilibrio	$[kg_w \cdot kg_s^{-1}]$

$c(T)$	Costante di BET	[-]
$err_{rel}$	Errore relativo dati sperimentali - modello	[-]
$m_{H_2O}$	Massa d'acqua nel campione	[kg]
$m$	Esponente correttivo del modello LDF	[-]
$m_{alluminio}$	Massa della lamina di alluminio	[kg]
$m_{secca}$	Massa del campione in condizioni secche	[kg]
$m_{umida}$	Massa del campione in condizioni umide	[kg]
$n$	Esponente correttivo del modello di Arrhenius	[-]
$p$	Pressione	[Pa]
$p_{atm}$	Pressione atmosferica	[bar]
$p_{sat}$	Pressione di saturazione	[Pa]
$t$	Tempo	[s]
$u$	Capacità di adsorbimento	[kg·kg <sup>-1</sup> ]
$v$	Volume totale adsorbito	[m <sup>3</sup> ]
$v_m$	Volume adsorbito da monolayer	[m <sup>3</sup> ]
$w$	Capacità di adsorbimento di acqua	[kg <sub>w</sub> ·kg <sub>s</sub> <sup>-1</sup> ]
$w_{in}$	Capacità di adsorbimento di acqua iniziale	[kg <sub>w</sub> ·kg <sub>s</sub> <sup>-1</sup> ]
$wt_1$	Water uptake complessivo del coating	[kg <sub>w</sub> ·kg <sub>s</sub> <sup>-1</sup> ]
$wt_2$	Water uptake del coating	[kg <sub>w</sub> ·kg <sub>s</sub> <sup>-1</sup> ]
$wt_3$	Water uptake della sola parte attiva del coating	[kg <sub>w</sub> ·kg <sub>s</sub> <sup>-1</sup> ]
$x$	Titolo	[-]
$\theta$	Frazione siti di adsorbimento occupati	[-]
$\Phi(r)$	Potenziale di Lennard-Jones in funzione di $r$	[kJ·mol <sup>-1</sup> ]
$\Phi_D(r)$	Potenziale attrattivo in funzione di $r$	[kJ·mol <sup>-1</sup> ]
$\Phi_R(r)$	Potenziale repulsivo in funzione di $r$	[kJ·mol <sup>-1</sup> ]
$\varepsilon$	Profondità buca di potenziale	[kJ·mol <sup>-1</sup> ]
$\theta$	Tempo adimensionale	[-]
$\sigma$	Diametro che approssima l'atomo o la molecola in un modello a sfere rigide	[nm]
$\tau$	Fattore di tortuosità	[-]
$\Delta bil$	Accuratezza bilancia	[g]

---

$\Delta_{termbil}$	Accuratezza termobilancia	[g]
$\Delta w$	Errore sul calcolo del water uptake w	[ $kg_w \cdot kg_s^{-1}$ ]
$\%SG_{stimata}$	Percentuale teorica di silica gel stimata all'interno del campione	[%]

## 1 INTRODUZIONE

A causa dell'aumento delle temperature, la disponibilità di aria condizionata diventa sempre più necessaria in diverse parti del mondo e nei prossimi decenni questa richiesta, guidata dalla crescita economica e dall'urbanizzazione delle zone più calde della Terra, continuerà ad aumentare. La crescita demografica, infatti, sta principalmente coinvolgendo paesi le cui temperature sono calde e umide, ovvero le condizioni climatiche più avverse alla refrigerazione; inoltre, i sistemi di condizionamento stanno diventando accessibili a più persone grazie all'aumento dei livelli di reddito. [1]–[3]

Di conseguenza se non si interviene e si prosegue con i trend attuali, il settore edilizio sarà responsabile di consumi energetici ed emissioni di anidride carbonica molto elevati. Già ad oggi la refrigerazione è responsabile per il 40 ÷ 60 % dei picchi di consumo elettrico in molte città; inoltre, in Unione europea il settore edilizio è causa del 40 % dei consumi finali di energia e del 36 % delle emissioni totali di anidride carbonica. [1], [2], [4], [5]

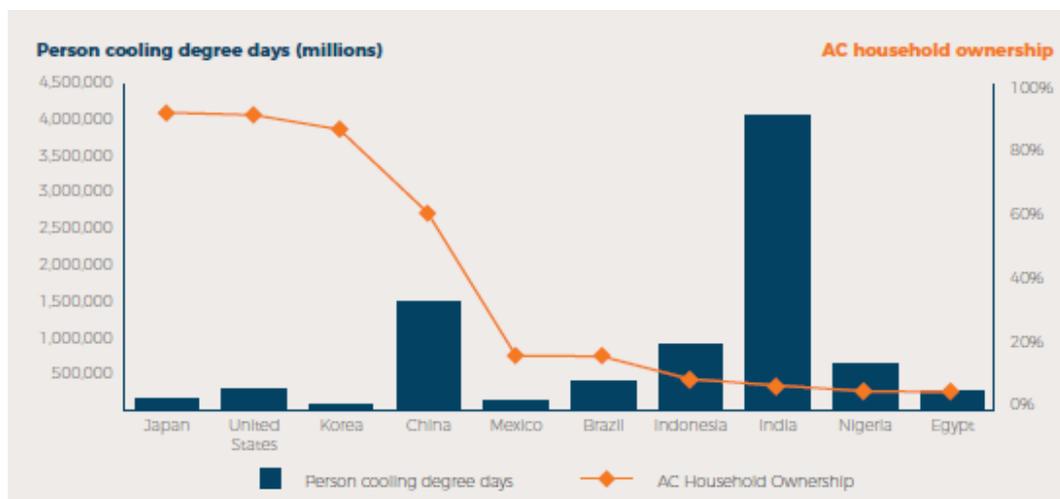


Figura 1.1: Domanda di raffreddamento rispetto all'attuale proprietà di sistemi di condizionamento in diversi paesi [1]

La direzione verso cui si sta dirigendo il mondo, il cosiddetto “cold crunch”, mette a dura prova il raggiungimento degli obiettivi fissati nell’Accordo di Parigi, in particolare contenere il riscaldamento globale al di sotto dei 2 °C rispetto ai livelli preindustriali [1], [3]. Tant’è vero che l'uso di energia per il raffreddamento degli spazi sta crescendo più

velocemente di qualsiasi altra richiesta energetica negli edifici. Le vendite globali di climatizzatori sono cresciute costantemente e significativamente: dal 1990 le vendite annuali sono più che triplicate. Ad oggi ne sono in uso circa 1,6 miliardi di cui più della metà in soli due paesi: la Cina e gli Stati Uniti. Inoltre, alcuni di questi condizionatori hanno efficienze energetiche scarse e mantenerli in funzione costa oltre 2000 TWh di elettricità ogni anno. Quasi un quinto di tutta l'elettricità usata negli edifici è per il raffreddamento. [3]

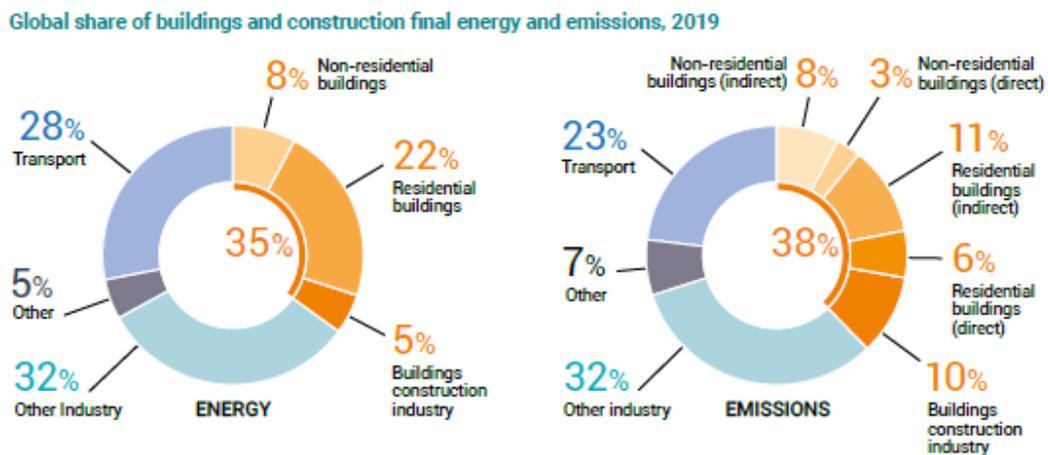


Figura 1.2: Consumi energetici ed emissioni globali del settore edilizio nel 2019 [2]

In questo contesto nasce, all'interno del programma europeo *Horizon 2020*, il progetto *RE-COGNITION* che si incentra sullo sviluppo di tecnologie che utilizzino il più possibile fonti rinnovabili in nuovi sistemi di raffrescamento e climatizzazione estiva negli edifici. L'obiettivo finale è quello di ottenere edifici a energia zero, o meglio ancora, edifici a energia positiva, i quali vengono riconosciuti come una delle soluzioni più praticabili per raggiungere l'obiettivo della de-carbonizzazione. Tuttavia, è necessaria un'integrazione politico tecnologica per cambiare l'attuale parco edilizio europeo altamente inefficiente, al fine di ristabilire l'efficacia dei costi e facilitare nuovi investimenti per l'integrazione delle tecnologie ad energia rinnovabile negli edifici. [4], [5]

Il progetto *RE-COGNITION* riconosce la necessità di stabilire sinergie tra la produzione, la conversione e il consumo di energia rinnovabile attraverso lo sviluppo di tecnologie trasversali che possano lavorare senza soluzione di continuità in cooperazione e raggiungano un bilancio energetico adattabile a più ambienti e scopi. [5]

RE-COGNITION è volto, dunque, ad affrontare il problema dell'autonomia energetica degli edifici realizzando un quadro di integrazione delle tecnologie rinnovabili e mirando principalmente a casi d'uso che coinvolgano ambienti edilizi di piccole e medie dimensioni. In particolare, sfrutterà la produzione energetica proveniente da più tecnologie di energia rinnovabile (RET) e consentirà il loro abbinamento ottimale con le tecnologie di stoccaggio per soddisfare la domanda di elettricità, riscaldamento, raffreddamento e acqua calda in modo efficiente ed esattamente quando necessario. [4], [5]

In tale panorama si inserisce il lavoro di questa tesi volta allo studio di un sistema ibrido di climatizzazione ambientale basato sull'utilizzo di energia solare e di silica gel per il controllo dell'umidità relativa. Il sistema sfrutta uno scambiatore di calore alettato su cui viene eseguito un trattamento di coating. Facendo attraversare lo scambiatore da un flusso d'aria umida, il materiale adsorbente si carica di vapore acqueo e deumidifica l'aria. Una volta terminato il processo di adsorbimento e di accumulo d'acqua nel materiale, è necessario rigenerare il silica gel per poterlo riutilizzare; ciò si ottiene aumentando la temperatura dello scambiatore per mezzo di fonti di calore di tipo rinnovabile oppure calore di scarto. Inserendo in parallelo due scambiatori uguali, alternandone il funzionamento in adsorbimento e in rigenerazione, è possibile far funzionare il sistema senza interruzione, garantendo continuità di servizio e portando a risparmi energetici rispetto ad un sistema di refrigerazione tradizionale. [4]–[9]

Si riporta di seguito, per una più completa visione d'insieme, il funzionamento di altri sistemi che sfruttano materiali adsorbenti solidi per il controllo dell'umidità relativa.

Nei sistemi rotanti, o ruote, di essiccazione il materiale adsorbente è impregnato, rivestito o inserito sulla ruota: in una sua porzione l'aria umida viene deumidificata, nell'altra viene fornita aria calda per la rigenerazione, ovvero il processo che, tramite la fornitura di calore, scarica e riattiva il materiale per riportarlo in una condizione in cui gli sia nuovamente possibile ricaricarsi e ricominciare il processo in modo ciclico. La ruota gira costantemente ad una velocità fissa rendendo il processo di deumidificazione continuo [6], [8], [9]. La capacità di adsorbimento si riduce a causa del calore rilasciato durante il processo, le molecole gassose adsorbite rilasciano la loro energia cinetica nell'essiccante sotto forma di calore di

adsorbimento e aumentano la sua temperatura. Poiché il fenomeno di adsorbimento è esotermico, è necessario impiegare adeguate tecniche di raffreddamento simultaneo per ottenere una migliore capacità di adsorbimento. [6], [8]

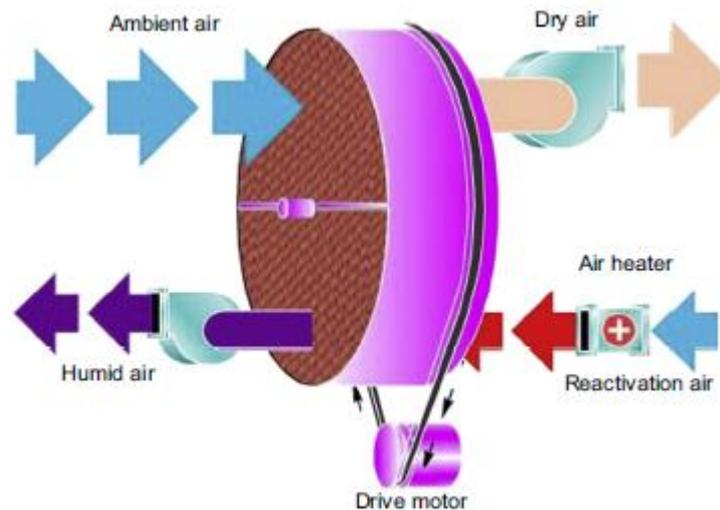


Figura 1.3: Schema funzionale di una ruota essiccante [8]

Nei sistemi a letto adsorbente, invece, la matrice essiccante è impacchettata su una struttura di sostegno fissa, detta letto, attraverso cui scorre l'aria umida. Quest'ultima e l'aria di rigenerazione scorrono alternativamente per ottenere rispettivamente la fase di deumidificazione e quella di rigenerazione: nella prima il materiale adsorbe l'umidità e produce aria secca, nella seconda dell'aria calda viene fatta passare attraverso la matrice essiccante per riattivarla, scaricandola dall'acqua adsorbita, e renderla disponibile per il successivo ciclo di deumidificazione. Poiché il processo di adsorbimento non è continuo, vengono installati più letti in parallelo per ottenere una deumidificazione senza interruzione; i flussi che attraversano i letti vengono invertiti grazie all'uso di valvole. Durante questo periodo di commutazione, a valvole chiuse, il letto caldo viene raffreddato dal refrigerante e il letto freddo viene riscaldato dalla sorgente di calore. Una volta che il letto caldo è sufficientemente raffreddato e il letto freddo sufficientemente riscaldato, vengono riaperte le valvole in modo da permettere i processi di adsorbimento e di rigenerazione. [6]–[8]

I sistemi a letto fisso sono facili da costruire, tuttavia un serio svantaggio è rappresentato da un basso coefficiente complessivo di trasferimento di calore, a causa dello

scarso contatto tra il letto e la matrice essiccante: ciò influisce negativamente sull'efficienza di trasferimento del calore, sulla capacità di adsorbimento e sulle prestazioni di raffreddamento. [6]–[8]

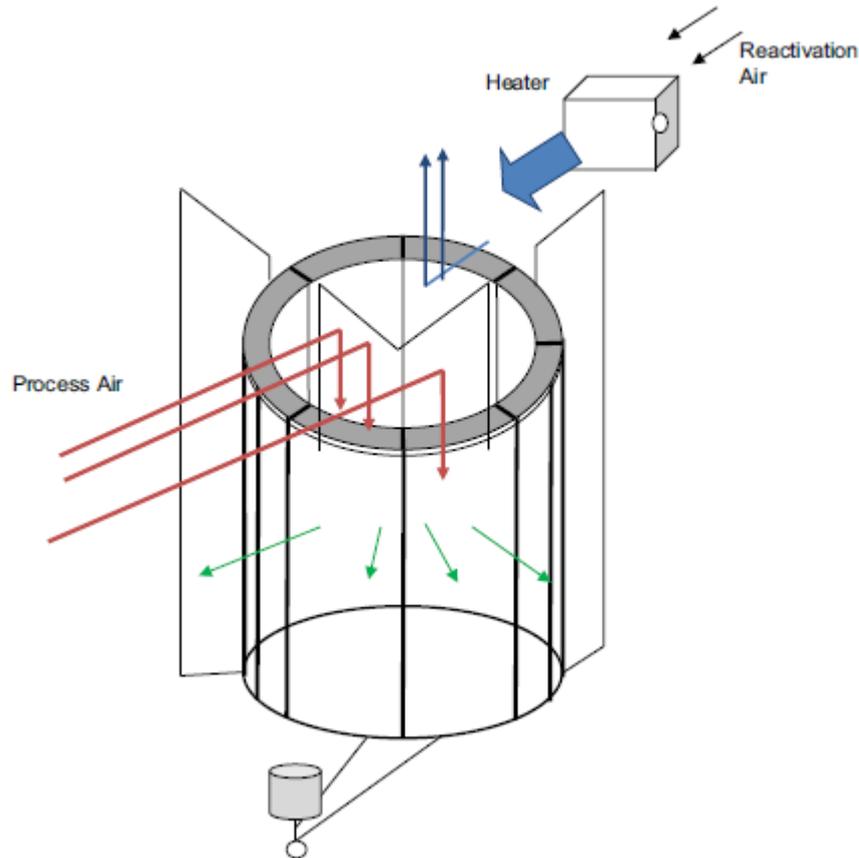


Figura 1.4: Schema funzionale di letti adsorbenti in parallelo [8]

Lo svantaggio presentato dai letti adsorbenti viene migliorato dagli scambiatori di calore rivestiti di materiale adsorbente tramite un processo di coating, in cui il corpo alettato è rivestito di materiale essiccante e l'aria di processo vi scorre lateralmente. Per aumentare la capacità di adsorbimento del materiale e rimuovere il calore, un fluido di raffreddamento viene fatto passare attraverso i tubi dello scambiatore durante la deumidificazione. Poiché il fluido di raffreddamento rimuove il calore di adsorbimento, una parte significativa del carico latente viene rimossa dall'aria e il carico di raffreddamento totale risulta ridotto. Se le prestazioni dei deumidificatori a letto fisso e a ruota essiccante sono compromesse a causa della bassa capacità di deumidificazione e della scarsa efficienza di trasferimento del calore, utilizzando gli scambiatori sottoposti a un processo di coating il calore di adsorbimento può

essere facilmente rimosso e il processo di deumidificazione reso più efficiente. I tassi di trasferimento del calore possono anche essere migliorati grazie all'alta conducibilità termica delle alette metalliche. Le capacità degli scambiatori di affrontare queste sfide specifiche hanno aperto la strada per un'efficace integrazione delle fonti di energia rinnovabile e pulita come il riscaldamento solare e il calore di scarto industriale. [7]

In questa dissertazione viene eseguita, supportata da un'analisi sperimentale, la caratterizzazione del silica gel in polvere, che si utilizza nell'ultimo sistema descritto, e in parallelo l'analisi viene svolta anche su silica gel in sfere per compararne i risultati. Viene dunque proposta una modellizzazione teorica del comportamento adsorbente del materiale, sia nella fase di deumidificazione sia in quella di rigenerazione. Il modello utilizzato, basato su un approccio di Linear Driving Force (LDF), è stato opportunamente calibrato e corretto con i risultati sperimentali. È stata poi sviluppata una tecnica di coating della polvere di silica gel su superfici lisce in alluminio, che simulano le alette dello scambiatore di calore: il coating è realizzato dal gel di silice disperso come seconda fase in una matrice di polidimetilsilossano (PDMS), che conferisce caratteristiche strutturali al materiale composito ottenuto; la capacità adsorbente del coating viene quindi testata in termini sperimentali e viene modellizzato il suo comportamento.

## 2 ADSORBIMENTO

### 2.1 Introduzione

Il fenomeno dell'adsorbimento consiste nell'adesione di molecole, atomi o ioni in stato liquido o gassoso sulla superficie di una sostanza solida chiamata adsorbente. La sostanza che si deposita su tale superficie prende invece il nome di adsorbato. Il termine adsorbimento indica, dunque, la fase di accumulo della sostanza; il processo inverso è chiamato desorbimento o rigenerazione. [8], [10]

Esistono due tipi di adsorbimento: il primo di tipo fisico mette in gioco forze intermolecolari piuttosto deboli (ad esempio forze di van der Waals); il secondo è di tipo chimico, chiamato *chemisorbimento*, ed è caratterizzato da legami intermolecolari forti (come legami covalenti).

Il comportamento dei due fenomeni è profondamente diverso: non solo l'entalpia di formazione dei legami tra adsorbente e adsorbato è di un ordine di grandezza maggiore per quanto riguarda il chemisorbimento, ma anche il calore sviluppato nella fase di adsorbimento è maggiore e il processo è di tipo irreversibile. Questi aspetti sono legati alla diversa interazione tra le sostanze che, come già detto, si concretizza nei diversi legami che si instaurano e di conseguenza in una non dissociazione delle specie adsorbite nel tipo fisico e in una possibile dissociazione in quello chimico. [10]

Nella seguente trattazione si farà sempre riferimento all'adsorbimento di tipo fisico, denominato, d'ora in poi, soltanto adsorbimento.

Le forze presenti nell'adsorbimento sono quelle di van der Waals e dell'interazione elettrostatica. Quest'ultima ha davvero importanza solo in casi in cui l'adsorbente ha una struttura di tipo ionico, come per le zeoliti. Negli altri casi l'interazione elettrostatica può essere trascurata.

Nel sistema considerato sono presenti forze di tipo attrattivo e forze di tipo repulsivo. Il potenziale attrattivo, dovuto alle forze di dispersione, può essere espresso come:

$$\Phi_D(r) = -\frac{A_1}{r_{12}^6} - \frac{A_2}{r_{12}^8} - \frac{A_3}{r_{12}^{10}} \quad (2.1)$$

dove:  $r_{12}$  è la distanza tra i centri delle molecole;  $A_1$ ,  $A_2$  e  $A_3$  sono delle costanti.

Il primo termine di (2.1) deriva dal dipolo istantaneo indotto, il secondo e il terzo rispettivamente dall'interazione tra dipolo indotto quadripolo e quadripolo indotto quadripolo. Il primo termine è il predominante.

Il potenziale di repulsione acquista importanza quando le distanze sono minime e può essere formulato come:

$$\Phi_R(r) = \frac{B}{r_{12}^{12}} \quad (2.2)$$

Trascurando i termini di ordine inferiore, dalle due equazioni precedenti, si giunge alla formulazione del potenziale di Lennard-Jones:

$$\Phi(r) = 4\varepsilon \left[ \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right] \quad (2.3)$$

dove le grandezze  $\varepsilon$  e  $\sigma$  dipendono dalla specie chimica considerata. [10], [11]

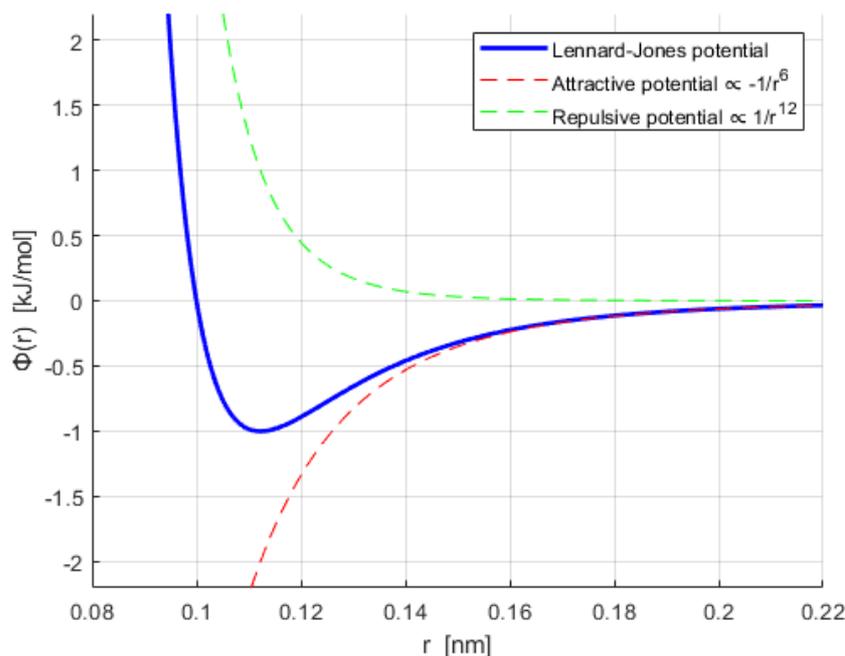


Figura 2.1: Potenziale di Lennard-Jones; sono stati utilizzati a titolo esemplificativo i valori di  $\varepsilon = 1$  kJ/mol e  $\sigma = 0,1$  nm

## 2.2 Isotherme di adsorbimento

Un parametro fondamentale in questa trattazione è la capacità di adsorbimento di un materiale (*uptake*), la quale indica la quantità di materiale adsorbito rispetto alla massa dell'adsorbente:

$$uptake = u = \frac{m_{adsorbato}}{m_{adsorbente}} \left[ \frac{kg_{adsorbato}}{kg_{adsorbente}} \right] \quad (2.4)$$

Per quanto riguarda questo lavoro sarà importante il *water uptake*, ovvero la quantità d'acqua adsorbita da un materiale rispetto alla sua massa propria (massa secca); questa grandezza è dunque definita come:

$$uptake_{water} = w = \frac{m_{umida} - m_{secca}}{m_{secca}} \left[ \frac{kg_{acqua}}{kg_{adsorbente}} \right] \quad (2.5)$$

dove le condizioni *umida* e *secca* fanno riferimento all'insieme di adsorbato e adsorbente valutato nella condizione di studio ( $m_{umida}$ ) e in una condizione di riferimento in cui si conosce che il contenuto di acqua è nullo ( $m_{secca}$ ). [12], [13]

L'isoterma di adsorbimento è la curva che mostra come varia il *water uptake* in funzione dell'umidità relativa a cui il sistema si trova, per una data temperatura. A seconda della concavità della curva l'adsorbimento può essere vantaggioso o meno.

Sono stati identificati sei modelli di isoterme in base alla classificazione IUPAC, a partire dai cinque proposti da Brunauer et al. precedentemente [10]. Nella figura seguente (*Figura 2.2*) si riportano gli andamenti caratteristici.

Il comportamento di tipo I rappresenta un materiale altamente idrofilo con un forte incremento a pressioni basse e poi un adagiamento fino al valore limite; i modelli di tipo II e IV sono comunque idrofili, ma con due step di forte incremento del *water uptake* a pressioni basse e medie [14]. Il III comportamento invece è di tipo idrofobico o poco idrofilo; mentre il modello V assomiglia al tipo III a bassa pressione e poi ha un ripido gradino a pressioni più elevate. Infine, il comportamento di tipo VI è inusuale ed è caratterizzato da un incremento di adsorbimento a piccoli step. [10], [14], [15]

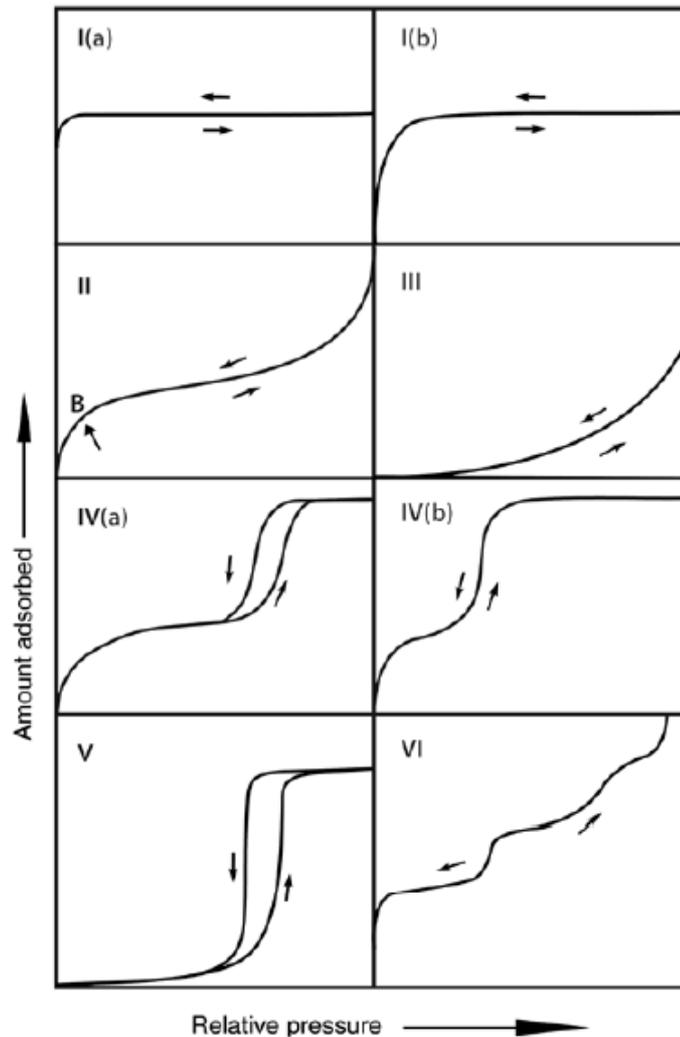


Figura 2.2: Isotherme di adsorbimento IUPAC [15]

Inoltre, in alcune tipologie (IV e V) si può notare un fenomeno di isteresi dovuto a comportamenti diversi delle fasi di adsorbimento e di desorbimento. [15]

### 2.3 Adsorbimento monolayer e multilayer

In tutti i modelli identificati dalle isoterme nel paragrafo precedente, durante il processo di saturazione di un materiale poroso (ovvero in fase di adsorbimento) è presente una progressione continua: da una situazione iniziale di materiale scarico, si passa a una in cui l'adsorbimento riguarda la porzione del materiale all'interfaccia della superficie di scambio (monolayer), fino ad arrivare alla partecipazione al processo di tutto quanto il materiale (multilayer).

### 2.3.1 MODELLO DI LANGMUIR

Il modello proposto da Langmuir è molto semplice ed è valido soltanto per l'adsorbimento su monolayer. Le assunzioni di questo modello sono:

- l'adsorbimento è limitato a uno strato;
- le molecole sono adsorbite in un numero fisso di siti localizzati ben definiti;
- i siti hanno tutti la stessa energia e ogni sito può contenere una sola molecola;
- l'interazione tra adsorbati è trascurabile rispetto a quella tra adsorbato e adsorbente;
- il processo è reversibile (adsorbimento e desorbimento).

Il parametro che regola questo modello è il grado di siti liberi rispetto a quelli occupati o viceversa. L'isoterma di Langmuir tiene conto dell'occupazione della superficie bilanciando i tassi relativi di adsorbimento e desorbimento (equilibrio dinamico). L'adsorbimento è proporzionale alla frazione della superficie dell'adsorbente che è libera, mentre il desorbimento alla frazione della superficie dell'adsorbente che è occupata. Dunque, l'equazione del modello può essere scritta come il raggiungimento dell'equilibrio dinamico tra la velocità di adsorbimento e quella di desorbimento, dato che in questa situazione le due velocità coincidono e possono essere eguagliate. Si ottiene:

$$\Theta = \frac{K(T) \cdot p}{1 + K(T) \cdot p} \quad (2.6)$$

Dove  $\Theta$  rappresenta la frazione di siti occupata,  $p$  la pressione e  $K(T)$ :

$$K(T) = \frac{K_{eq}}{R_u \cdot T} \quad (2.7)$$

In cui  $K_{eq}$  è la costante di adsorbimento all'equilibrio dipendente da fattori entalpici ed entropici,  $R_u$  è la costante universale dei gas. Il limite principale del modello di Langmuir è che nessun materiale possiede un adsorbimento che coinvolge un solo layer. [10], [16]

### 2.3.2 MODELLO BET

Il modello di Brunauer, Emmett e Teller (o BET) tiene conto anche della capacità di adsorbimento multilayer. Esistono due tipi di interazione: un adsorbimento di tipo verticale (o tra adsorbato e superficie o tra diversi layer di adsorbato) e uno di tipo orizzontale

all'interno dello stesso layer; quello di tipo orizzontale è trascurabile. Dunque, il sistema può essere visto come molti sistemi monolayer sovrapposti, in cui però le molecole dal secondo strato e successivi si comportano essenzialmente come liquido saturo, mentre la costante di equilibrio per il primo strato è diversa ed è funzione delle condizioni di lavoro (come nel precedente caso Langmuir). L'equazione BET è la seguente:

$$\frac{p}{v(p_{sat} - p)} = \frac{1}{v_m \cdot c(T)} + \frac{c(T) - 1}{v_m \cdot c(T)} \cdot \frac{p}{p_{sat}} \quad (2.8)$$

In cui  $p$  è la pressione di equilibrio dinamico,  $p_{sat}$  la pressione di saturazione,  $v$  è il volume totale adsorbito,  $v_m$  il volume adsorbito in un singolo monolayer e  $c(T)$  è la costante BET e vale:

$$c(T) = \exp\left(\frac{E_1 - E_L}{R_u \cdot T}\right) \quad (2.9)$$

In cui  $E$  è riferito all'energia di adsorbimento; il pedice 1 riguarda il primo strato (a contatto con la superficie) e il pedice L gli altri layer;  $R_u$  è la costante universale dei gas. Il parametro  $c$  è funzione di materiale e temperatura. [10], [15], [17]

## 2.4 Meccanismi di diffusione in mezzi porosi

I meccanismi e le teorie di diffusione sono numerosi, fra questi tre sono quelli che principalmente interessano il fenomeno di adsorbimento: diffusione molecolare, diffusione di Knudsen e diffusione superficiale. In realtà, la diffusione è un'unione di questi meccanismi, i quali singolarmente sono ragionevolmente facili da analizzare, ma la sovrapposizione dei loro effetti può essere molto complessa.

### 2.4.1 DIFFUSIONE MOLECOLARE

Se la diffusione attraverso i pori è solo di tipo molecolare, questa può essere descritta come:

$$D_p = \frac{D_m}{\tau} \quad [m^2 \cdot s^{-1}] \quad (2.10)$$

Dove  $D_m$  è la diffusione molecolare del sistema e  $\tau$  è il fattore di tortuosità. [10]

#### 2.4.2 DIFFUSIONE DI KNUDSEN

La diffusione di Knudsen si ha nel momento in cui la dimensione della particella è confrontabile con la dimensione del cammino libero medio della particella stessa. In queste condizioni la maggior parte delle collisioni non avviene tra particelle, ma tra particella e parete del poro. Nel momento in cui una particella impatta con il muro del poro, viene respinta nel canale in una direzione casuale che può non avere alcuna relazione con la direzione di provenienza. La diffusione di Knudsen è dovuta alla casualità della direzione della particella. [10]

$$D_K = 9700 \cdot R_p \cdot \left(\frac{T}{M}\right)^{\frac{1}{2}} \quad [cm^2 \cdot s^{-1}] \quad (2.11)$$

In cui:

- $r_p$  rappresenta il raggio della particella in *cm*;
- $T$  è la temperatura del sistema in *K*;
- $M$  è la massa molare della specie che sta diffondendo in *g/mol*.

#### 2.4.3 DIFFUSIONE SUPERFICIALE

Si ha diffusione superficiale se le particelle si dispongono direttamente sui siti di adsorbimento, ovvero sulla superficie di scambio. In situazioni in cui lo spessore del layer adsorbente è apprezzabile, un flusso che lambisce la superficie può determinare una significativa diffusione superficiale. Questa può essere espressa per mezzo dell'equazione di Arrhenius:

$$D_S = D_{S0} \cdot \exp\left(-\frac{E_a}{R_u \cdot T}\right) \quad [m^2 \cdot s^{-1}] \quad (2.12)$$

Dove:  $D_{S0}$  è una costante pre-esponenziale,  $E_a$  è l'energia di attivazione,  $R_u$  è la costante universale dei gas e  $T$  la temperatura. [10], [18], [19]

#### 2.4.4 DIFFUSIONE COMPLESSIVA

Come anticipato, la diffusione complessiva corrisponde alla sovrapposizione degli effetti di quelle elencate. Per quanto riguarda il caso studiato in questo lavoro, è possibile trascurare la diffusione molecolare e di Knudsen (che, volendo fare un parallelismo con un

circuito elettrico, possono essere viste tra loro in serie) e approssimare la diffusione complessiva con la diffusione superficiale (che, invece, potrebbe essere schematizzata in parallelo con la serie precedente). [18]–[20]

Di conseguenza la diffusione si valuterà dalla formula (2.12):

$$D = D_S = D_{S0} \cdot \exp\left(-\frac{E_a}{R_u \cdot T}\right) \quad [m^2 \cdot s^{-1}] \quad (2.12a)$$

Per quanto riguarda alcuni valori di  $E_a$  e  $D_{S0}$ , verranno fornite indicazioni sul silica gel nel paragrafo dedicato a tale materiale.

## 2.5 Materiali adsorbenti

I materiali adsorbenti sono l'elemento fondamentale del processo. Tali materiali, a seconda della dimensione dei pori, sono suddivisi in tre categorie: microporosi (< 2 nm), mesoporosi (2 ÷ 50 nm) e macroporosi (> 50 nm). I materiali più comunemente utilizzati sono: il gel di silice (SG), i carboni attivi (AC), le zeoliti (Ze) e i metal-organic framework (MOF).

Un elenco non esaustivo delle caratteristiche che un materiale adsorbente dovrebbe possedere è il seguente:

- area superficiale specifica e volume dei pori elevati per garantire un'alta capacità di adsorbimento verso l'adsorbato selezionato;
- affinità tra la superficie attiva dell'adsorbente e l'adsorbato;
- selettività verso un determinato adsorbato quando viene adsorbito da una miscela di gas;
- capacità di fornire trasporto di massa e cinetica di adsorbimento adeguati;
- conducibilità termica e capacità termica specifica tali da garantire un buon trasferimento di calore;
- facilità di rigenerazione, stabilità termica e chimica, lunga vita utile in condizioni operative per una resistenza a cicli ripetuti di carica e scarica;
- tossicità, impatto ambientale, corrosività, infiammabilità e compatibilità con i materiali di costruzione ottimali;

- basso costo, elevata disponibilità, facilità di manipolazione e di modellazione.

Di base però questi materiali hanno proprietà non ottimali che potrebbero comprometterne l'uso, quali basse densità di imballaggio, scarsa capacità di trasferimento del calore, limitate capacità di adsorbimento, degradazione in breve tempo. Sono stati allora sviluppati dei materiali adsorbenti compositi: ai materiali adsorbenti puri, che costituiscono la matrice, sono stati aggiunti potenziatori di capacità termica (TCE) e leganti, in modo da sfruttare la stabilità e il basso costo dei materiali di base ma potenziarne le proprietà utili al funzionamento ottimale dei sistemi ad adsorbimento. [14], [21], [22]

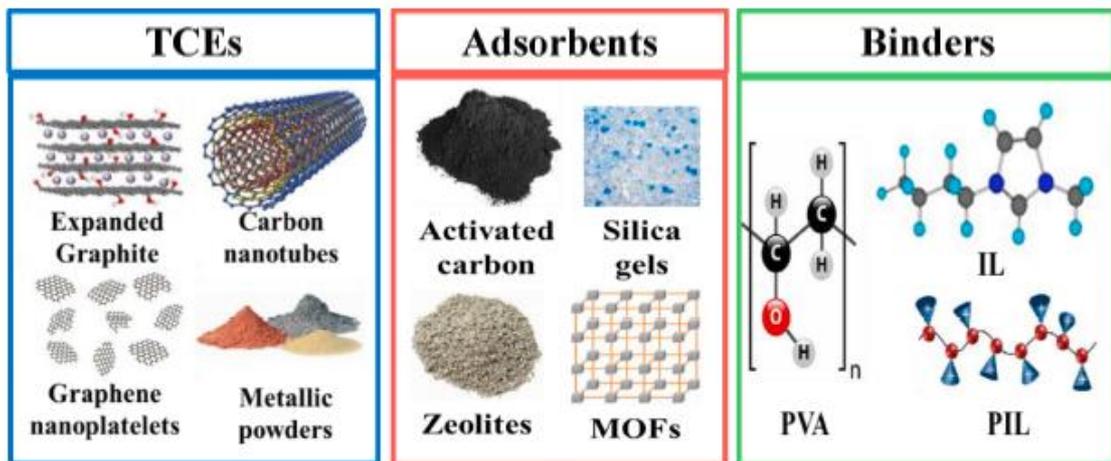


Figura 2.3: Esempi di componenti di materiali adsorbenti compositi [21]

In generale l'introduzione di una seconda fase comporta una diminuzione della superficie e del volume disponibili all'interno del materiale, dato che in parte vengono riempite le microcavità della matrice; ciononostante le caratteristiche della fase dispersa fanno sì che il water uptake aumenti. Ciò è causato dal carattere complesso dell'assemblaggio della seconda fase durante la sua deposizione sulla superficie del materiale di base. In alcuni casi la quantità di adsorbimento dell'acqua è aumentata di 2-3 volte rispetto al materiale puro [21], [23]. Di seguito si riporta una possibile classificazione e suddivisione dei materiali adsorbenti compositi, dove da tre categorie generali vengono suddivisi nelle famiglie già citate a seconda della loro matrice di base.

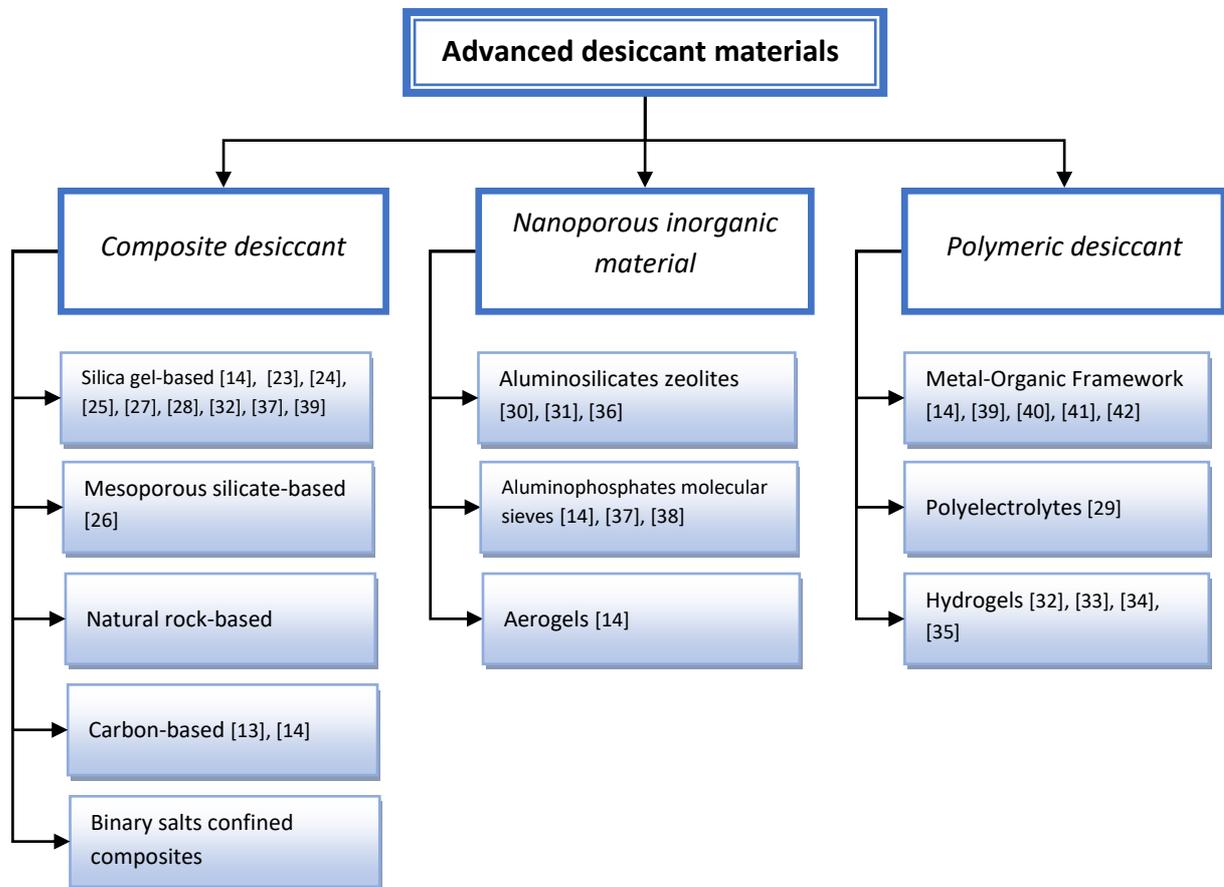


Figura 2.4: Categorie materiali adsorbenti compositi

## 2.6 Analisi e confronto materiali

Si elencano di seguito i materiali adsorbenti analizzati, che sono stati reperiti in letteratura, e si riportano in dettaglio le loro caratteristiche. La spiegazione delle sigle utilizzate per indicare i materiali si trova in *Tabella 2.4*.

Ref.	Material composition	Base	T [°C]	RH [%]	Pv [kPa]	W [kg <sub>w</sub> /kg <sub>s</sub> ]	T <sub>reg</sub> [°C]	Surf area [m <sup>2</sup> /g]	Pore vol [cm <sup>3</sup> /g]	Hazard symbols
[13]	AC(81%)+SG(19%)	AC	25	95	3,01	0,35	115	682	0,324	1(2), 2(1)
[13]	AC(33%) + SG(3%) + CaCl <sub>2</sub> (64%)	AC	25	95	3,01	0,85	115	83	0,059	1(2), 2(2)
[13]	AC(74%) + SG(22%) + CaCl <sub>2</sub> (4%)	AC	25	95	3,01	0,3	115	680	0,327	1(2), 2(2)
[13]	AC(66%) + SG(13%) + CaCl <sub>2</sub> (21%)	AC	25	95	3,01	0,5	115	160	0,088	1(2), 2(2)
[24]	SG(50%) + ENG-TSA(50%)	SG	30	70	2,97	0,1		160	0,45	2(1), 5(3), 6(1)
[25]	SG(98%) + PVP(2%)	SG	30	94	4,00	0,3		572	0,274	∅
[26]	MSG(87%) + CaCl <sub>2</sub> (13%)	SG	25	70	2,22	0,3		461,3	0,63	2(2)
[26]	MSG(72,70%) + CaCl <sub>2</sub> (27,30%)	SG	25	70	2,22	0,4		290,4	0,51	2(2)

[26]	MSG(61,60%) + CaCl <sub>2</sub> (38,40%)	SG	25	70	2,22	0,5		208,7	0,39	2(2)
[26]	MSG(49%) + CaCl <sub>2</sub> (51%)	SG	25	70	2,22	0,65		151,8	0,23	2(2)
[27]	SG : sodium polyacrylate : polyacrylic acid (10 : 1 : 1)	SG	25	70	2,22	0,24	50÷60	152,9	0,208	2(2)
[28]	SG + LiCl(30%)	SG	30	39	1,66	0,6	80	204	0,65	2(4)
[28]	SG + LiCl(40%)	SG	30	39	1,66	0,75	80	179	0,55	2(4)
[29]	CMC-g-AA/B	Cel	25	60	1,90	0,2419		104,2	0,2592	∅
[29]	CMC-g-AM/B	Cel	25	60	1,90	0,2222		127,3	0,3269	∅
[30]	Ze(90%) + PTFE(10%)	Ze	20	60	1,40	0,213			0,361	2(2)
[30]	Ze(80%) + SiC(10%) + PTFE(10%)	Ze	20	60	1,40	0,197			0,439	2(2)
[30]	Ze(80%) + Graphite(10%) + PTFE(10%)	Ze	20	60	1,40	0,189			0,357	2(2)
[30]	Ze(80%) + Al(OH) <sub>3</sub> (20%)	Ze	20	60	1,40	0,224			0,226	2(2)
[30]	Ze(60%) + Al(OH) <sub>3</sub> (40%)	Ze	20	60	1,40	0,233			0,201	2(2)
[31]	AQSOA-Z01	Ze	40	70	5,17	0,22				2(2)
[31]	AQSOA-Z02	Ze	40	70	5,17	0,33				2(2)
[31]	AQSOA-Z05	Ze	20	70	1,64	0,235				2(2)
[32]	SA SG (5:1)	Hyd	20	70	1,64	0,61		106,2	0,25	∅
[32]	SG	SG	20	70	1,64	0,16		347,1	0,81	∅
[33]	P(AA-co-AM)-SPH	Hyd	25	70	2,22	0,45	60			∅
[33]	P(AA-co-AM)-SPH + Lap-RD 4,0g	Hyd	25	70	2,22	0,5	60			∅
[34]	P(SAC+AA)-SPH	Hyd	25	70	2,22	0,4				1(1), 2(2)
[34]	P(SAC+AA)-SPH + CaCl <sub>2</sub> (50%)	Hyd	25	70	2,22	1,2				1(1), 2(2)
[35]	PNIPAM-SG	Hyd	20	70	1,64	0,35	40	169,1	0,62	∅
[35]	PNIPAM-SG + LiCl(30%)	Hyd	20	70	1,64	1,6	40	103,6	0,34	2(4)
[36]	ZMS-5 zeolite	Ze	40	70	5,17	0,175		282,5		2(2)
[36]	5A zeolite	Ze	40	70	5,17	0,2		474,1		2(2)
[14]	SG(8-10 nm)	SG	40	60	4,43	0,08	90			∅
[14]	SG(8-10 nm) + CaCl <sub>2</sub> (30%)	SG	40	60	4,43	0,35	90			2(2)
[14]	SG(8-10 nm) + CaCl <sub>2</sub> (50%)	SG	40	60	4,43	0,42	90			2(2)
[14]	SG(4-7 nm)	SG	40	60	4,43	0,13	90			∅
[14]	SG(4-7 nm) + CaCl <sub>2</sub> (30%)	SG	40	60	4,43	0,33	90			2(2)
[14]	SG(4-7 nm) + CaCl <sub>2</sub> (50%)	SG	40	60	4,43	0,48	90			2(2)
[14]	SG(2-3 nm)	SG	40	60	4,43	0,26	90			∅
[14]	SG(2-3 nm) + CaCl <sub>2</sub> (30%)	SG	40	60	4,43	0,22	90			2(2)
[14]	SG(2-3 nm) + CaCl <sub>2</sub> (50%)	SG	40	60	4,43	0,28	90			2(2)
[14]	AC	AC	30	100	4,25	0,67			0,6915	1(2), 2(1)
[14]	OAC	AC	30	100	4,25	0,56			0,5963	1(2), 2(1)
[14]	RAC (N <sub>2</sub> )	AC	30	100	4,25	0,6			0,6418	1(2), 2(1)
[14]	RAC (H <sub>2</sub> )	AC	30	100	4,25	0,62			0,6338	1(2), 2(1)
[14]	ROAC (N <sub>2</sub> )	AC	30	100	4,25	0,73			0,7311	1(2), 2(1)
[14]	ROAC (H <sub>2</sub> )	AC	30	100	4,25	0,76			0,701	1(2), 2(1)
[14]	SG + LiBr(35%)	SG	20	80	1,87	0,93	90÷120			2(4)
[14]	SG + LiCl(10%)	SG	30	68	2,89	0,47	90	293	0,91	2(4)
[14]	SG + LiCl(20%)	SG	30	68	2,89	0,72	90	242	0,75	2(4)
[14]	SG + Ca(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	SG	35	15	0,84	0,19	75÷80	60	0,24	5(2), 7(3)
[14]	SG + LiNO <sub>3</sub>	SG	35	21	1,18	0,22	65÷75			2(3), 7(3)
[14]	SiO <sub>2</sub>	AE	20	70	1,64	0,15				∅
[14]	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	AE	20	70	1,64	0,1				∅
[14]	SiO <sub>2</sub> - Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	AE	20	70	1,64	0,19				∅
[14]	A1 (6,7 Si/Al)	AIPO	25	90	2,85	0,55	87	1010,3	0,82	6(3)
[14]	A3 (8,7 Si/Al)	AIPO	25	90	2,85	0,46	87	931,3	0,52	6(3)
[14]	FAM-Z01 (FAPO-5 iron 2- 8mol%)	AIPO	25	50	1,58	0,18	60			2(2)
[14]	DUT-4 (Al(OH)(NDC))	MOF	25	90	2,85	0,28		3017	0,79	∅
[14]	ZIF-8	MOF	25	90	2,85	0,02		1360	0,64	2(1), 6(1)

[14]	MIL-100(Cl)	MOF	25	50	1,58	0,6	80	1522		2(2)
[14]	MIL-100(SO <sub>4</sub> )	MOF	25	50	1,58	0,61	80	1456		2(2)
[14]	MIL-101(Cr)	MOF	25	70	2,22	0,92	90	2059	1,103	2(1)
[14]	MIL-100(Al)	MOF	25	90	2,85	0,52	140	1814	1,14	2(2)
[14]	MIL-101-H	MOF	25	60	1,90	1,3	80	3124	1,56	2(1)
[14]	MIL-101-NH <sub>2</sub>	MOF	25	60	1,90	0,94	80	2146	1,22	2(1)
[14]	MIL-101-NO <sub>2</sub>	MOF	25	60	1,90	0,93	80	2509	1,07	2(1)
[14]	MIL-101-SO <sub>3</sub> H	MOF	25	60	1,90	0,68	80	1920	0,92	2(1)
[14]	Basolite F300	MOF	25	80	2,54	0,33	140	1300÷ 1600		2(4), 5(2)
[37]	RD SG (grain size 7 µm)	SG	30	70	2,97	0,22	50÷80		1,26	∅
[37]	FAM Z01 slurry	AIPO	30	70	2,97	0,19	50÷80		1,42	
[37]	FAM Z05 slurry	AIPO	30	70	2,97	0,21	50÷80		1,40	
[23]	SG type B	SG	20	70	1,64	0,2		487	0,82	∅
[23]	SG type B + LiCl(36%)	SG	20	70	1,64	0,58		205	0,46	2(4)
[38]	SAPO-34	AIPO	20	70	1,64	0,315	55	592	0,28	2(2)
[38]	FAPO-34	AIPO	20	70	1,64	0,225	55	183	0,08	2(2)
[39]	HKUST-1 (C <sub>18</sub> H <sub>6</sub> Cu <sub>3</sub> O <sub>12</sub> )	MOF	20	70	1,64	0,44		1500÷ 2100	0,35	3(3), 4(2)
[39]	MIL-100 (C <sub>9</sub> H <sub>3</sub> FeO <sub>6</sub> )	MOF	20	70	1,64	0,36		1300÷ 1600	0,16÷ 0,35	2(2)
[39]	SG RD-2060	SG	20	70	1,64	0,26		840	1	∅
[40]	Basolite A520 (Al Fumarate)	MOF	25	70	2,22	0,38	40÷50			2(2)
[40]	MIL-125(Ti)	MOF	25	70	2,22	0,32	40÷50			2(1)
[40]	UiO-66(Zr)	MOF	25	70	2,22	0,52	40÷50			∅
[40]	MOF-808(Zr)	MOF	25	70	2,22	0,3	40÷50			∅
[41]	Cr-soc-MOF-1	MOF	25	70	2,22	1,4			0,381	
[41]	Y-shp-MOF-5	MOF	25	70	2,22	0,45			0,963	
[41]	MIL-53(Al)-OH	MOF	25	70	2,22	0,18	140			2(2), 5(1)
[41]	MOF-303(Al)	MOF	25	70	2,22	0,42			1,159	
[41]	CAU-23(Al)	MOF	25	70	2,22	0,4	60		1,07	
[41]	MIL-160(Al)	MOF	30	70	2,97	0,38			1,068	
[41]	CAU-10(Al)-H	MOF	25	70	2,22	0,36	70		1,15÷ 1,60	∅
[41]	MOF-841(Zr)	MOF	25	70	2,22	0,47			1,05	2(1)
[41]	MIP-200(Zr)	MOF	25	70	2,22	0,44	63		1,16	
[41]	MIL-125(Ti)-NH <sub>2</sub>	MOF	25	70	2,22	0,415	70÷90		0,81	2(1)
[41]	MOF-801(Zr)	MOF	25	70	2,22	0,35	85		1,68	2(1)
[41]	CoCl <sub>2</sub> (BTDD)	MOF	25	70	2,22	0,91	55		0,67	3(1), 4(2), 5(2)
[42]	MOF-PHCM	MOF	23	80	2,25	1,62	60			2(2), 4(3)

Tabella 2.1: Caratteristiche materiali adsorbenti. Sono indicati in tabella: la matrice del materiale (Base), il nome del materiale ed eventuali elementi aggiunti (Material composition), la temperatura (T), l'umidità relativa (RH), la pressione di vapore (Pv) a cui sono effettuate le misure, la capacità di adsorbimento rilevata (W), la temperatura di rigenerazione del materiale (T<sub>reg</sub>), l'area superficiale (Surf area), il volume dei pori (Pore vol) e sono elencati i codici dei simboli di pericolo (Hazard symbols); nella prima colonna a sinistra sono inseriti i riferimenti bibliografici

In relazione alla Tabella 2.1 si forniscono le seguenti informazioni.

- In Tabella 2.2 sono riportati i valori della pressione di saturazione del vapore acqueo utilizzati (valori tabellari).

T [°C]	P_vap,sat [bar]	P_vap,sat [kPa]
20	0,0233932	2,33932
23	0,0281107	2,81107
25	0,0316993	3,16993
30	0,0424697	4,24697
35	0,0562902	5,62902
40	0,0738494	7,38494

Tabella 2.2: Valori tabellari della pressione di saturazione del vapore acqueo in funzione della temperatura

- In *Tabella 2.3* si elencano i fattori di rischio dei vari materiali riportati nell'ultima colonna della *Tabella 2.1* (codici da 1 a 7) la cui scala di gravità è indicata tra parentesi dopo il codice: (1) meno grave e (4) più grave. Esistono diverse scale di rischio a seconda del paese e dell'ente che le rilascia e a seconda di classificazioni più o meno moderne: in questa trattazione si è cercato di riportare tutti i dati reperiti in letteratura in una scala con valori da 1 a 4, in accordo con i parametri americani. Il simbolo "Ø" indica che la sostanza non è classificata come pericolosa.

Hazard symbols		
n.	Simbolo	Significato
1		Infiammabile
2		Irritante
3		Tossico
4		Pericoloso per l'ambiente
5		Tossico per l'uomo
6		Corrosivo
7		Comburente

Tabella 2.3: Simboli di pericolo, la scala varia da (1) meno grave a (4) più grave

- Si riporta di seguito la spiegazione di abbreviazioni e sigle usate in *Tabella 2.1*.

SIGLA	SIGNIFICATO
AC	carbone attivo
SG	silica gel
Ze	Zeolite
Cel	Cellulosa
AE	Aerogel
Hyd	Idrogel
ENG-TSA	expanded natural graphite with sulfuric acid
PVA	polyvinyl alcohol
PVP	polyvinyl pyrrolidone
HEC	hydroxyethyl cellulose
TEOS	Tetraethoxysilane
MSG	macroporous silica gel
EG	expanded graphite
EC-500	type of EG
EC-100	type of EG
CMC-g-AA/B	hygroscopic carboxymethyl cellulose synthesized by solution polymerization with acrylic acid, impregnating silica gel type B into copolymer solution
CMC-g-AM/B	hygroscopic carboxymethyl cellulose synthesized by solution polymerization with acrylamide, impregnating silica gel type B into copolymer solution
PTFE	Polytetrafluoroethylene
SiC	Silicon carbide
AIPO	alumino-phosphate
SAPO	silico-alumino-phosphate
SA	sodium alginate ( $\text{NaC}_6\text{H}_7\text{O}_6$ )
FAPO	ferro alumino phosphate
MOF	metal-organic framework
OAC	AC oxidation
RAC (X)	AC reduced in X
ROAC (X)	AC oxidation and then reduced in X
NCD	naphthalene-2,6-dicarboxylate
AA	acrylic acid
AM	Acrylamide
SPH	superporous hydrogels
Lap-RD	Laponite-Regual density
SAC	sodium acrylate
PNIPAM	Poly(N-isopropylacrylamide)
PHCM	Precise Humidity Control Material

Tabella 2.4: Sigle e abbreviazioni della Tabella 2.1

### 2.6.1 SILICA GEL

Il gel di silice (SG) è una forma non completamente essiccata di acido silicico colloidale polimerico. La composizione chimica si può esprimere come  $SiO_2 \cdot nH_2O$ . Ha una grande affinità con l'acqua (in quanto molecola polare) e ne esistono diverse tipologie sul mercato che variano in funzione di alcuni parametri geometrici. L'SG di tipo RD (*regular density*) è quello con il water uptake più significativo, è un materiale poroso la cui dimensione dei pori varia da 2 a 14 nm; ha un valore d'area superficiale specifica che generalmente è compreso tra 800 e 340  $m^2/g$ ; il volume specifico dei pori spazia da 0,43 a 1,15  $cm^3/g$  [10], [21]. Inoltre, l'SG di tipo RD ha una curva isoterma di tipo I (*Figura 2.5*), ovvero ha un buon comportamento idrofilo ma la capacità di adsorbimento è relativamente bassa, come si vedrà nel successivo confronto.

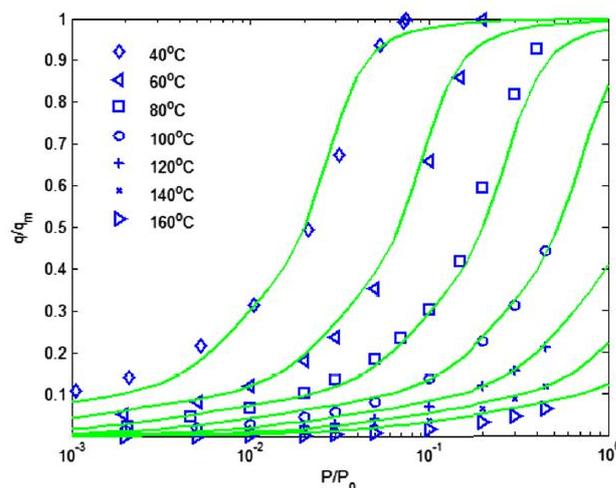


Figura 2.5: Curve isoterme del silica gel RD ( $q/q_m$  indica la quantità adsorbita  $q$  rispetto al valore di equilibrio  $q_m$ ) [31]

Il gel di silice è soggetto a deterioramento, ciò comporta un decadimento delle prestazioni. In particolare, il continuo ciclo adsorbimento-desorbimento causa una perdita di capacità di adsorbimento dovuta ad una modifica strutturale della silice. Anche venendo a contatto con materiali metallici, come la superficie di uno scambiatore su cui il materiale adsorbente è utilizzato (ad esempio nel coating), vi è un decremento del water uptake poiché gli ioni metallici, presenti nei loro ossidi, possono occupare parzialmente i pori del materiale; da alcune prove di [43] il fenomeno dovrebbe essere poco influente. Diverse particelle inquinanti però possono causare questo stesso fenomeno e ridurre la capacità adsorbente del materiale; questa in alcuni esperimenti è stata ristabilita con immersioni in soluzioni acide e lavaggi in acqua distillata. [43], [44]

Molti sono i parametri che possono influenzare il processo, tra cui la dimensione dei grani che influisce sulla velocità di adsorbimento, infatti grani più piccoli rispondono prima rispetto a grani più grossi [19], e la dimensione dei pori che aumenta la capacità di adsorbimento quando i pori sono più piccoli [14].

Il water uptake del SG può aumentare con la formazione di materiali compositi. In [45] le prestazioni di due scambiatori, per quanto riguarda la rimozione media di umidità, sono quasi due volte maggiori con la drogatura di SG con un polimero a parità di altre condizioni. Allo stesso modo in [46] l' SG composito con cloruro di litio mostra vantaggi nell'incremento del water uptake. Altri sali che forniscono ottime prestazioni sono  $CaCl_2$  e  $LiBr$  [23].

Adottando un materiale composito è bene studiarne i tempi di ciclo ottimali, sia nella fase di adsorbimento sia in quella di desorbimento per massimizzarne le proprietà, e valutare la temperatura dell'acqua di raffreddamento del sistema che influisce sul risultato ottenuto poiché a temperature minori la capacità di adsorbimento aumenta. Altri parametri da controllare sono la velocità dell'aria che lambisce il materiale e un eventuale tempo di preraffreddamento in seguito alla fase di rigenerazione (desorbimento). [23], [46]

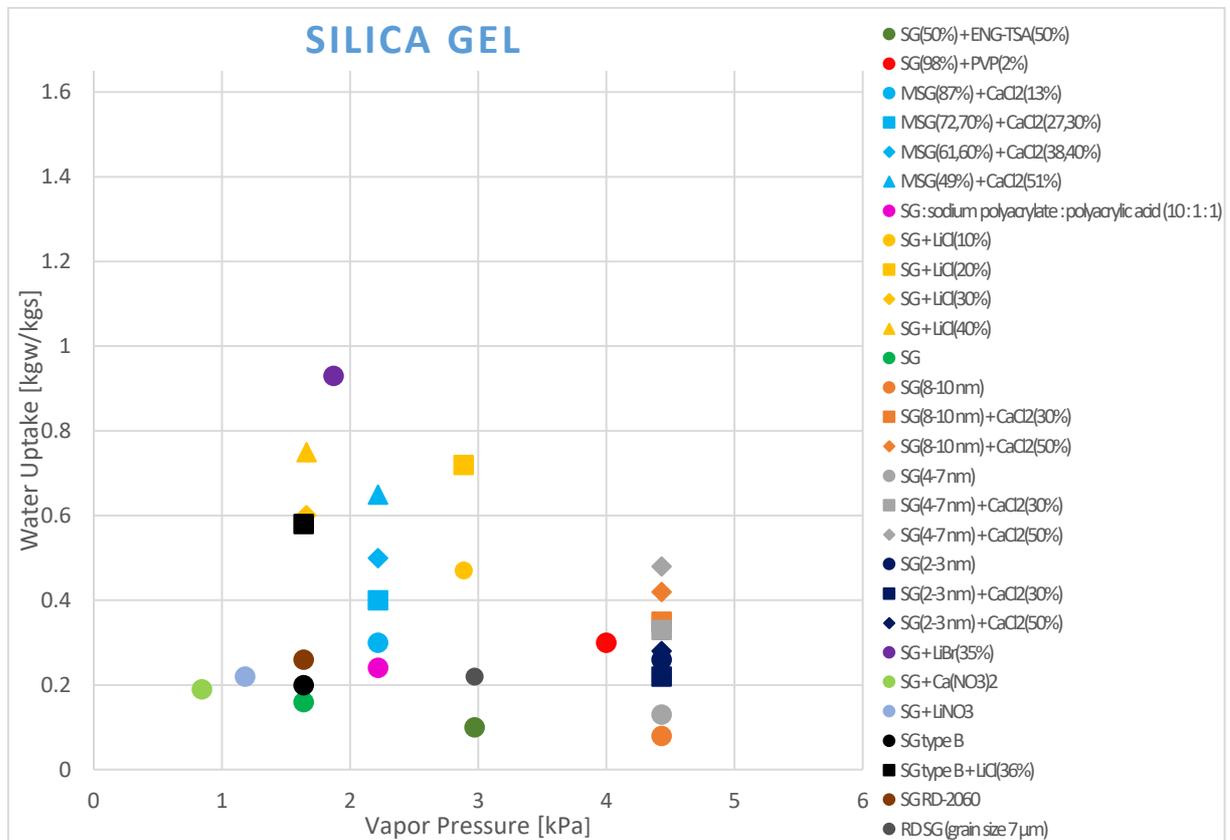


Figura 2.6: Water uptake di gel di silice

In *Figura 2.6* sono stati riportati i valori di adsorbimento di SG e alcuni suoi composti a determinate pressioni di vapore. La pressione di vapore ( $P_V$ ) sintetizza in un unico dato le due informazioni che determinano la condizione di lavoro del materiale: la temperatura e l'umidità relativa (RH). Queste sono legate dalla formula:

$$P_V = RH \cdot P_{Vsat|T} [kPa] \quad (2.13)$$

dove  $P_{Vsat|T}$  è la pressione di vapore saturo dell'aria espressa in *kPa* ad una temperatura  $T$  imposta. I dati completi sono elencati in *Tabella 2.1*.

### 2.6.1.1 Diffusione nel gel di silice

Riprendendo la formulazione espressa in (2.12), si riportano, per comodità in questa sezione, alcuni dati reperiti in letteratura sui valori dell'energia di attivazione  $E_a$  e della costante pre-esponenziale  $D_{S0}$  del silica gel. Tali dati saranno utili per un successivo confronto nell'analisi dei risultati ottenuti con la modellazione proposta.

Rif	tipo materiale	$D_{S0} [m^2/s]$	$E_a [kJ/mol]$
[47]	RD silica gel	$2,54 \cdot 10^{-4}$	42
[19]	Fuji Davison RD silica gel	$2,90 \cdot 10^{-4}$	41,5
[48]	Fuji RD silica gel	$2,5 \cdot 10^{-4} \div 2,8 \cdot 10^{-4}$	40 $\div$ 41,2
[18]	Fuji A type silica gel	$2,54 \cdot 10^{-4}$	42

Tabella 2.5: Valori di  $E_a$  e  $D_{S0}$  per silica gel

### 2.6.2 ZEOLITI E CARBONI ATTIVI

Le zeoliti (Ze) sono alluminosilicati cristallini (di elementi alcalino o alcalino-terrosi) la cui struttura consiste in un assemblaggio di tetraedri di  $SiO_4$  e  $AlO_4$  dove ogni atomo di ossigeno è condiviso tra due strutture tetraedriche di  $Si$  o  $Al$ . La loro capacità di adsorbimento è regolata dal rapporto  $Si/Al$ : il comportamento idrofilo sarà maggiore per tassi  $Si/Al$  bassi (anche se mai inferiori a 1); invece all'aumentare del tasso la loro capacità di adsorbimento diminuisce fino a farli diventare materiali idrofobi per rapporti  $Si/Al$  con valori maggiori di 8 o 10. L'abbondanza di alluminio infatti è responsabile della creazione di siti attivi idrofili che permettono l'uso di questi materiali come adsorbenti. Le zeoliti naturali

(tipo A, X, Y) hanno lo svantaggio di possedere temperature di rigenerazione piuttosto alte, ma la creazione di zeoliti adsorbenti composite permette di abbassare questo valore, oltre a migliorare altre proprietà del materiale quali: la conducibilità termica, la densità di imballaggio e la capacità di adsorbimento. [10], [14], [21]

La curva dell'isoterma di adsorbimento delle zeoliti può cambiare a seconda della tipologia di zeolite e del legante utilizzato in caso di zeoliti composite. Le curve più comuni delle isoterme sono di tipo I, IV e V. [31]

I carboni attivi (AC) sono essiccanti solidi ampiamente utilizzati grazie al grande volume dei pori e all'elevata area superficiale. Gli AC si formano dalla decomposizione ad alta temperatura di materiali ad alto tenore di carbonio; la loro struttura è costituita da microcristalli elementari di grafite uniti in configurazioni casuali, lo spazio generato tra i cristalli forma i micropori. La curva di adsorbimento degli AC è di tipo V e i carboni attivi base hanno un comportamento poco idrofilo; il risultato combinato di ossidazione, riduzione e realizzazione di un materiale composito (per mezzo, ad esempio, di sali igroscopici) può aumentare notevolmente la capacità di adsorbimento anche per i materiali polari (acqua per il caso in esame). Alcuni AC compositi hanno dunque volume dei pori e area superficiale elevati e un buon water uptake, a cui si aggiunge per le caratteristiche proprie del materiale una temperatura di rigenerazione relativamente bassa:  $55 \div 60$  °C. Per questi motivi gli AC compositi possono essere una valida alternativa nei sistemi ad adsorbimento. [10], [13], [14], [21]

In *Figura 2.7* sono riportati in un grafico le zeoliti e i carboni attivi analizzati. La capacità di adsorbimento è espressa in funzione della pressione di vapore, calcolata con l'equazione (2.13); i dettagli per ogni materiale sono riportati in *Tabella 2.1*.

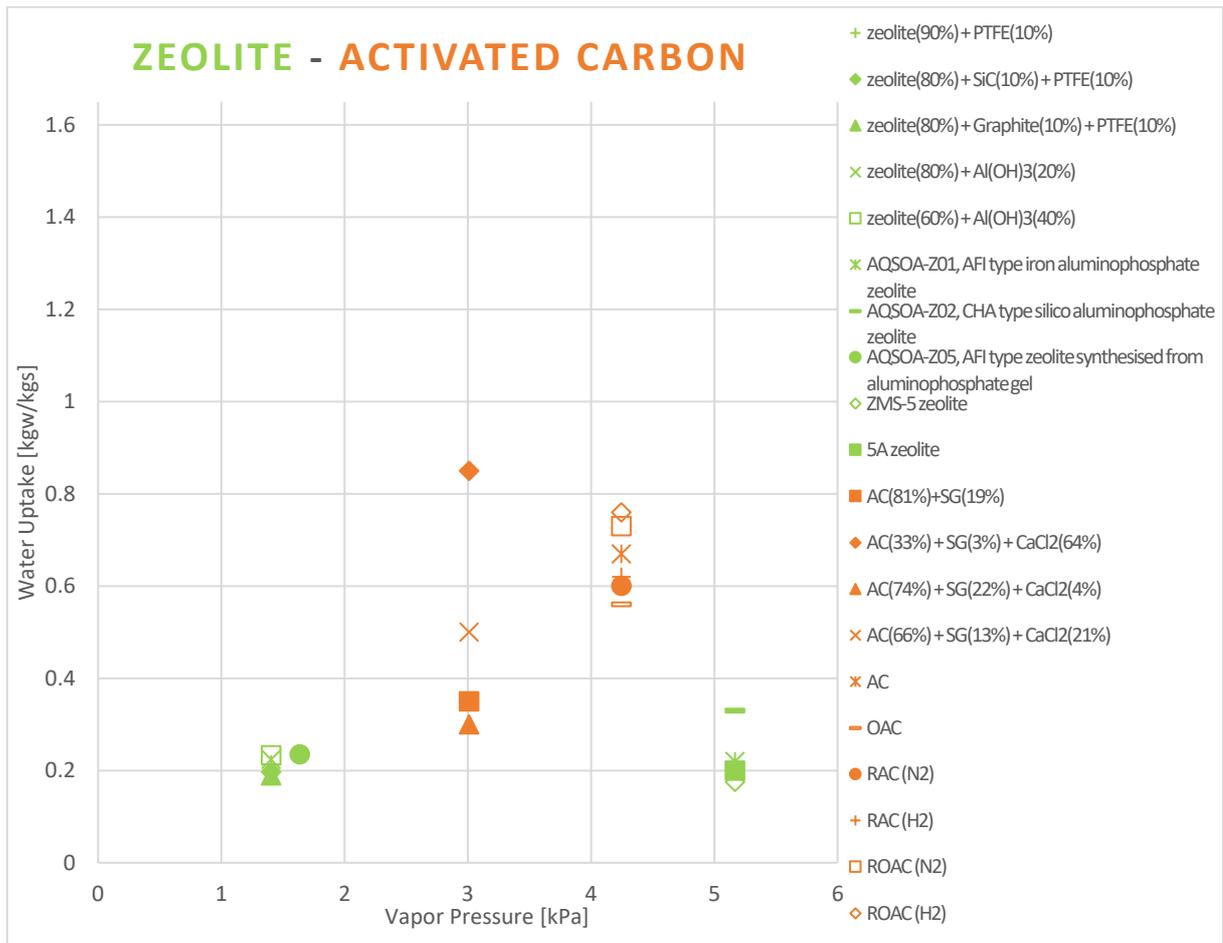


Figura 2.7: Water uptake di zeoliti e carboni attivi

### 2.6.3 ALLUMINOFOSFATI, AEROGEL, CELLULOSA, IDROGEL

I setacci molecolari a base di alluminofosfati comprendono diverse categorie, tra cui gli *AIPO* (alluminofosfati), i *SAPO* (silicoalluminofosfati) e i *FAPO* (ferroalluminofosfati) e sono simili alle zeoliti. Possono assumere una ricca varietà di forme strutturali in cui sono presenti molte cavità, canali e siti attivi; possiedono una curva di adsorbimento di tipo V così come i carboni attivi. Si prestano dunque al ruolo di materiali adsorbenti. [14], [38]

Recenti studi hanno verificato che la temperatura di rigenerazione per questi materiali può essere, in alcuni casi, inferiore ai 50 °C e in generale relativamente bassa. [38], [49], [50]

Un aerogel (AE) è un materiale poroso nanostrutturato con un'elevatissima percentuale di aria al suo interno (> 90 % in volume). Per molto tempo il più conosciuto ed utilizzato è stato quello sintetizzato a partire dal gel di silice ( $SiO_2$ ), ma successivamente ne sono stati sviluppati di nuovi a partire da altri ossidi, come ad esempio dall'allumina ( $Al_2O_3$ ),

con buoni risultati. La caratteristica principale degli aerogel è possedere elevata capacità di adsorbimento [14]. Allo stesso tempo però il loro limite è possedere questo grande water uptake solo a percentuali di umidità relativa vicine alla saturazione, cosa che ne riduce fortemente l'utilizzo se il range di lavoro dell'RH spazia anche sotto l'85 % poiché il water uptake crolla significativamente (*Figura 2.8*).

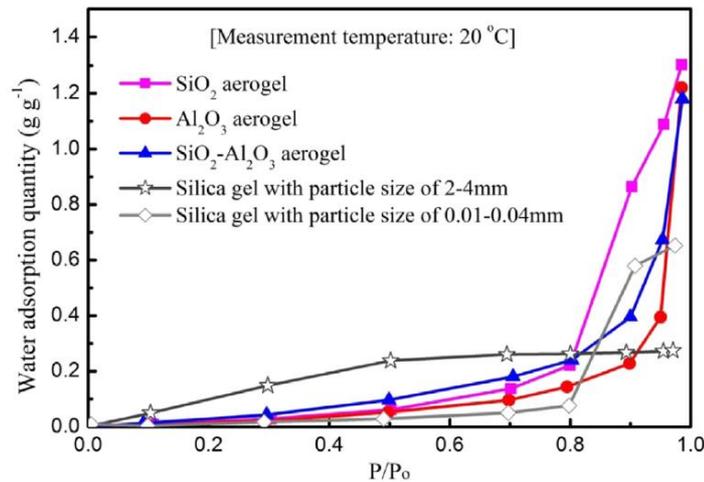


Figura 2.8: Isoterme di adsorbimento per alcuni aerogel a 20 °C [14]

Fang et al. [29], al fine di sfruttare i vantaggi sia del gel di silice sia di alcuni polimeri igroscopici, hanno ottenuto nuovi materiali composti a partire dalla carbossimetilcellulosa (CMC) igroscopica sintetizzata per polimerizzazione in soluzione con acido acrilico o con acrilamide, impregnando il gel di silice di tipo B nella soluzione del copolimero. I risultati sperimentali hanno effettivamente mostrato che sono stati uniti i vantaggi dei componenti di partenza e il nuovo materiale adsorbente può essere utilizzato come tale. [29]

Per quanto riguarda la famiglia degli idrogel (Hyd), gli alginati sono stati studiati da Lin et al. [32] per migliorarne le caratteristiche di adsorbimento grazie all'introduzione nella matrice, composta da alginato di sodio (SA) ( $NaC_6H_7O_6$ ), di silica gel come seconda fase dispersa. Dai risultati sperimentali il composito con un rapporto tra alginato di sodio e gel di silice pari a 5:1 ha mostrato i risultati migliori e prestazioni superiori a quelle di SA o SG testati da soli [32]. Altri idrogel polimerici sono stati analizzati in [33]–[35] in cui l'aggiunta di alcuni sali ha fatto ottenere ottimi risultati per quanto riguarda la capacità di adsorbimento.

Il risultato migliore è stato registrato da un composto a base di PNIPAM (ovvero Poly(N-isopropylacrylamide)) e silica gel con un trattamento in un bagno di cloruro di litio. [35]

Nell'immagine seguente (Figura 2.9) sono riportati i materiali appena descritti; i dettagli sono specificati in Tabella 2.1.

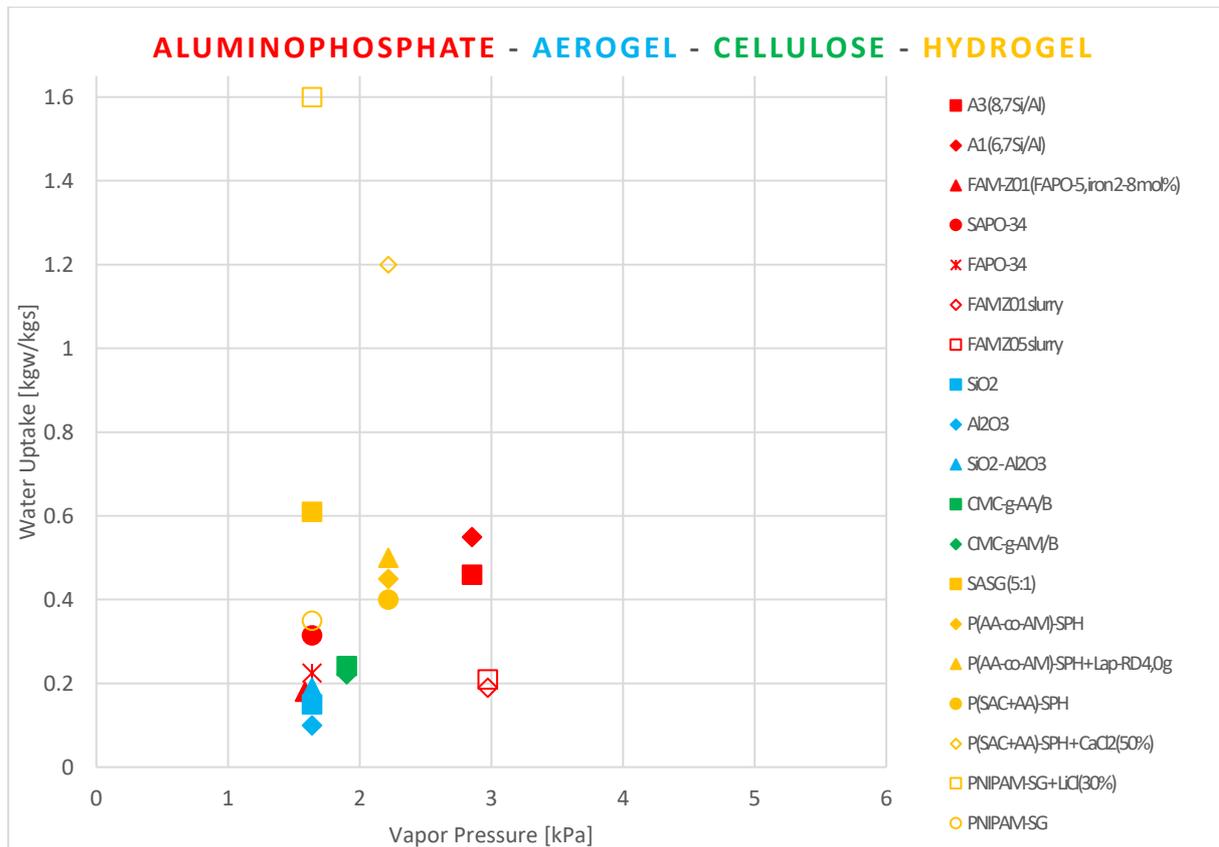


Figura 2.9: Water uptake di alluminofosfati, aerogel, cellulosa e idrogel

#### 2.6.4 MOF

I Metal-Organic Framework (MOF) sono una classe di materiali porosi che comprende gruppi inorganici collegati a leganti organici in dimensioni singole o multiple; il risultato è una struttura porosa cristallina con un elevato grado di adattabilità strutturale e di applicabilità. I MOF hanno un'alta area superficiale, un grande volume dei pori e una variabilità fisico-chimica senza precedenti a causa della loro composizione facilmente modificabile. In termini di sistemi ad adsorbimento, queste proprietà fanno sì che si possano configurare materiali con elevate capacità di water uptake. Infatti, le caratteristiche superficiali dei MOF superano tutte quelle dei materiali adsorbenti comunemente utilizzati e

riportati anche in questo trattato (SG, AC, zeoliti, ecc.): indicativamente si parla di un'area superficiale specifica fino a 5500 m<sup>2</sup>/g [39], un volume dei pori di circa 2,0 cm<sup>3</sup>/g [14] e un'elevata stabilità idrolitica che possono portare a una quantità d'acqua adsorbita che è circa il doppio del peso del MOF [21]. Pertanto, i MOF sono oggi considerati tra i materiali più promettenti. Tuttavia, ci sono molti problemi impegnativi da risolvere prima di utilizzarli in applicazioni pratiche: il miglioramento delle proprietà termofisiche, la stabilità e l'ottimizzazione delle isoterme di adsorbimento, la sostituzione di alcuni elementi tossici o nocivi adesso utilizzati. Infine, i MOF sono in grado di lavorare in fase di desorbimento a temperature molto basse; in alcuni casi queste possono arrivare addirittura a 40 °C. [14], [21], [39]–[42], [51]

Si riporta il grafico in cui è rappresentata la capacità di adsorbimento dei MOF analizzati in funzione della pressione di vapore (ricavata con l'equazione (2.13)), *Figura 2.10*; i dettagli dei materiali si trovano in *Tabella 2.1*.

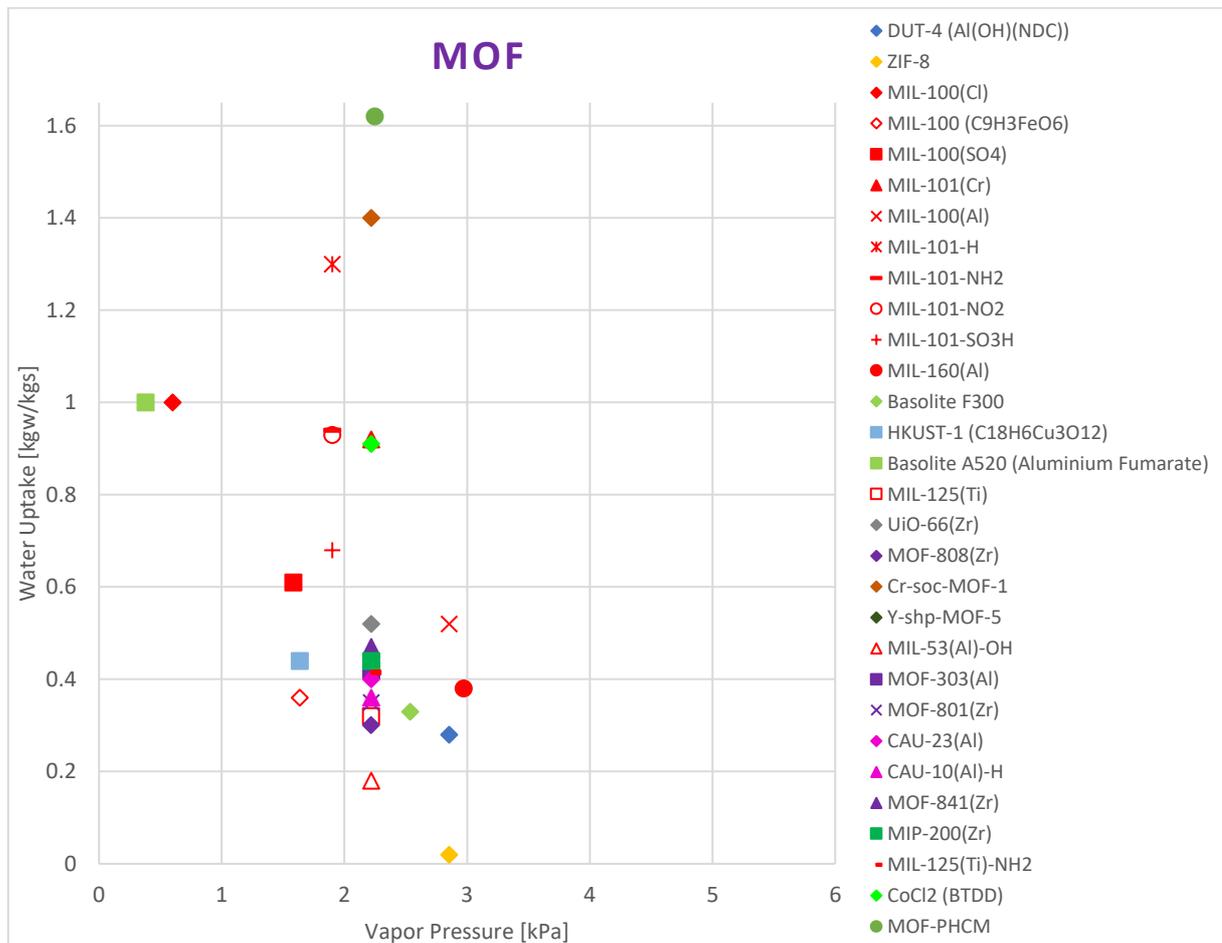
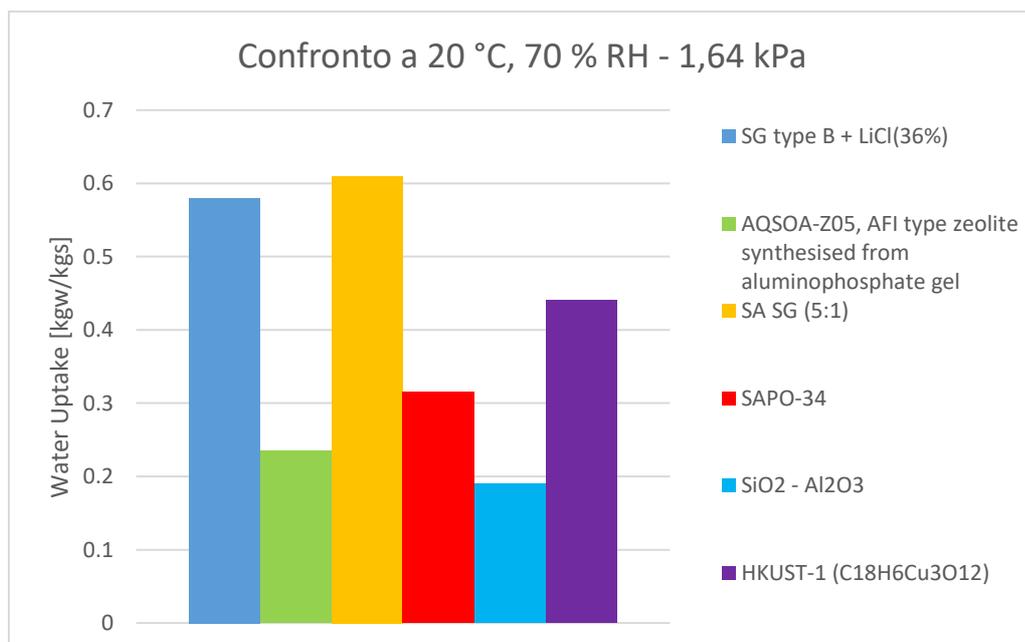


Figura 2.10: Water uptake di MOF

## 2.7 Considerazioni conclusive

È stato effettuato un confronto tra i grafici precedentemente riportati (*Figura 2.6, Figura 2.7, Figura 2.9, Figura 2.10*) e sono stati valutati contemporaneamente diversi materiali adsorbenti nelle stesse condizioni di temperatura e umidità relativa, cioè alla stessa pressione di vapore.

Questo confronto, riportato in *Figura 2.11*, è interessante ma è bene ricordare che non può essere esaustivo. Infatti, per esserlo, e dunque per poter dire con precisione quale sia il miglior materiale adsorbente, sarebbe necessario che tutti i materiali analizzati avessero espresso il dato di water uptake nelle medesime condizioni di temperatura e umidità, ma purtroppo per i dati trovati in letteratura non è così. Anche in questo ipotetico caso, però, non sarebbe possibile dire in assoluto quale sia il materiale ottimale per un'applicazione reale. Infatti, in una situazione pratica si lavora in un range di temperature e di umidità relative e dunque una sola coppia di dati non sarebbe rappresentativa della grande diversità che i valori della capacità di adsorbimento possono raggiungere al modificarsi (anche per variazioni minime) delle condizioni di lavoro, come mostrato dalle curve di adsorbimento delle pagine precedenti. In quel caso sarebbe quindi necessaria un'analisi più approfondita e mirata allo specifico caso.



*Figura 2.11: Confronto tra alcuni materiali adsorbenti a 20 °C e 70 % RH*

Infine si riporta un metodo di confronto proposto da [14] in cui la capacità di adsorbimento è espressa in funzione della temperatura di rigenerazione di ogni materiale. Il grafico (Figura 2.12) ha l'obiettivo di identificare il materiale adsorbente ottimale da utilizzare nell'ambito del recupero di calore di scarto o del calore prodotto da fonti sostenibili a bassa temperatura [14]. In ogni caso le affermazioni riportate precedentemente riguardo alle condizioni di lavoro fornite in forma puntuale restano valide.

Nella Figura 2.12 si rileva che i materiali MOF sembrano essere i più promettenti grazie alle elevate capacità di adsorbimento a temperature di rigenerazione relativamente basse; si notano materiali con temperature di rigenerazione minori, ma con water uptake decisamente meno prestazionali. Viene dunque ribadito che la scelta del materiale adsorbente deve essere fatta in funzione della specifica applicazione pratica e delle relative condizioni al contorno.

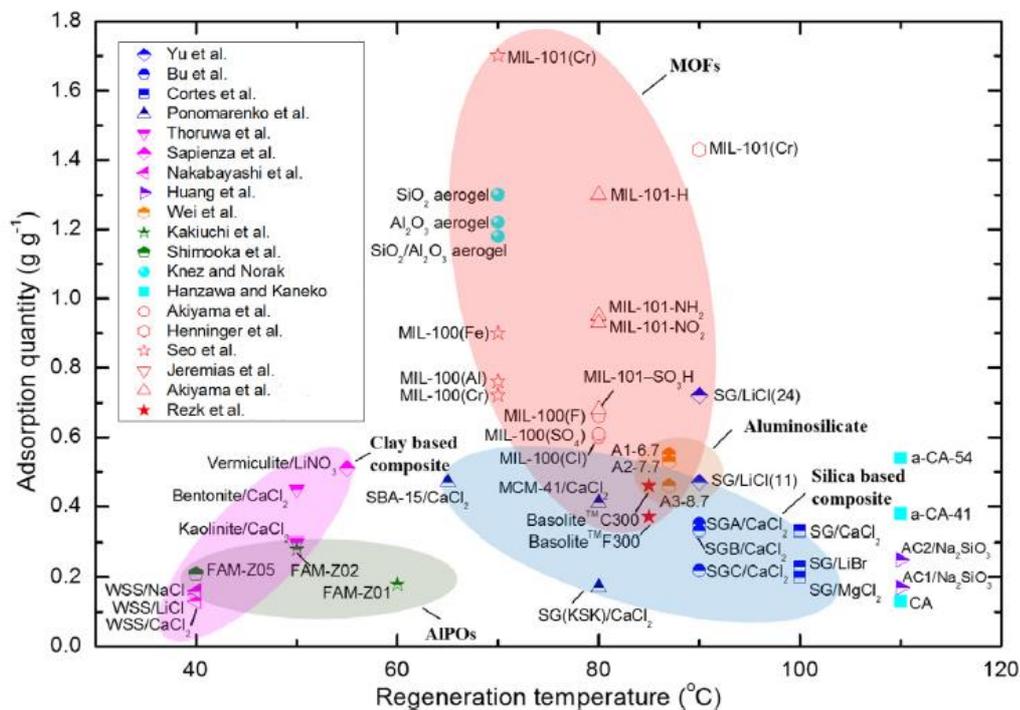


Figura 2.12: Analisi del water uptake in funzione della temperatura di rigenerazione [14]

In conclusione, si riassume brevemente quanto descritto nel capitolo:

- panoramica su adsorbimento fisico e definizione adsorbimento del vapore acqueo;
- diffusione in mezzi porosi, meccanismi esistenti e approssimazioni accettabili;
- analisi materiali adsorbenti e descrizione delle loro caratteristiche in funzione della famiglia di appartenenza;
- confronto conclusivo tra alcuni materiali a parità di temperatura e umidità relativa;
- considerazioni finali sul materiale ottimale da utilizzare in funzione dell'applicazione reale.

### 3 CARATTERIZZAZIONE DEL MATERIALE

Come anticipato in §1 *Introduzione*, il materiale cercato per l'applicazione nel sistema per il controllo dell'umidità relativa verrà posizionato su uno scambiatore di calore tramite il processo di *coating*. Questa tecnica, descritta nei capitoli successivi, permette di applicare un film di uno spessore di qualche centinaio di micrometri sulle superfici delle alette; il materiale principale, che conferisce capacità adsorbente, è il silica gel in polvere (la taglia dei grani è di 20  $\mu\text{m}$  di diametro).

In questo capitolo viene effettuata la caratterizzazione della polvere di gel di silice e, per attuare un confronto, del silica gel in sfere di 2,5 ÷ 4,0 mm di diametro.

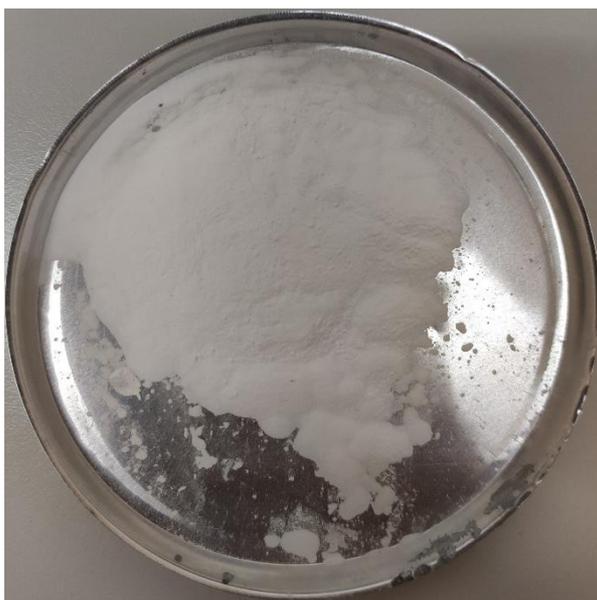


Figura 3.1: Campione silica gel in polvere



Figura 3.2: Campione silica gel in sfere

#### 3.1 Procedura seguita

La caratterizzazione del materiale è stata eseguita nel seguente modo:

- test di adsorbimento per 4h, dopo aver sottoposto il materiale a un desorbimento di 2h a 60 °C, 120 °C e 180 °C;
- test di desorbimento per 2h a 50 °C, 60 °C, 70 °C, 80 °C, 100 °C, 120 °C e 180 °C;

- sia i test di adsorbimento sia quelli di desorbimento sono stati valutati in diverse condizioni di umidità relativa: 32 %, 43 %, 70 % e 92 %.

Il parametro oggetto d'analisi è il water uptake dei materiali, il quale è stato calcolato secondo la formula (2.5), in cui il valore di massa secca ( $m_{secca}$ ) è quello ottenuto alla fine della rigenerazione del campione di materiale a 180 °C.

### 3.1.1 STRUMENTI DI ANALISI

Il desorbimento è stato eseguito nella termobilancia *Kern DBS 60-3* [52], in cui è possibile controllare con precisione la temperatura di rigenerazione. Inoltre, la termobilancia fornisce la variazione della massa del campione ogni 5 secondi per le 2 ore di desorbimento. Il datasheet della termobilancia è riportato in appendice §A.1. *Datasheet termobilancia Kern DBS 60-3*. La macchina ha una sensibilità di 0,001 g e un'accuratezza di  $\pm 0,003$  g.



Figura 3.3: Termobilancia Kern DBS 60-3

L'adsorbimento è stato eseguito in appositi box, *Figura 3.4*, in cui una soluzione di acqua e cloruro di calcio mantiene in equilibrio, a una determinata condizione di umidità relativa, l'ambiente all'interno del box. La condizione di RH di equilibrio è funzione della concentrazione del sale sciolto nell'acqua.



Figura 3.4: Box a diverse condizioni di umidità relativa

Un sistema di controllo collegato ad ogni box, come si evince dalla figura, monitora costantemente le condizioni (temperatura e umidità). La sensibilità legata al dato di umidità relativa è del  $\pm 2\%$ .

Le misure di massa dei campioni sono state manualmente svolte tramite la bilancia Kern KB 360-3N [53] ad intervalli di tempo regolari per 4 ore. Il datasheet della bilancia è riportato in appendice §A.2. *Datasheet bilancia Kern KB 360-3N*; la bilancia ha una sensibilità di 0,001 g e un'accuratezza di  $\pm 0,005$  g.



Figura 3.5: Bilancia Kern KB 360-3N

## 3.2 Test di adsorbimento

I test di adsorbimento sono stati svolti per entrambe le tipologie di silica gel (in polvere e in sfere), a partire da tre diverse condizioni di rigenerazione, e dunque di water uptake iniziale (desorbimento precedente svolto per 2 ore a 60 °C, 120 °C e 180 °C), e inserendo il campione in quattro diverse condizioni di umidità relativa di equilibrio dell'ambiente di lavoro (32 %, 43 %, 70 % e 92 %). La temperatura dell'ambiente di test è, per tutti i test di adsorbimento,  $21 \pm 1$  °C.

### 3.2.1 PROCEDURA DEL TEST

Il test è stato svolto nel seguente modo.

- Si esegue la tara del piattino (sulla bilancia) su cui poi viene collocato il materiale. La massa di materiale utilizzata è dell'ordine di pochi grammi (circa 2 g).
- Il campione di materiale viene rigenerato per due ore alla temperatura stabilita (in termobilancia).
- Trascorso questo tempo il campione viene inserito nel box a umidità relativa controllata.
- Ad intervalli prestabiliti il campione viene prelevato e pesato sulla bilancia. In funzione della massa in un certo istante temporale e della massa secca (valutata precedentemente a 180 °C) si calcola il water uptake del materiale.
- Il test viene eseguito per i due materiali, le tre temperature di rigenerazione e le quattro condizioni di umidità relativa.

### 3.2.2 BARRA DI ERRORE

I punti delle curve di water uptake ottenuti in funzione del tempo hanno una barra di errore dovuta all'accuratezza degli strumenti di misura e alla propagazione di tali accuratezze, dato che la misura non è direttamente svolta sul water uptake. Le misure affette da un errore sono:

- la tara del piattino, eseguita sulla bilancia, errore  $\pm 0,005$  g;
- la massa secca del campione a 180 °C, eseguita su termobilancia, errore  $\pm 0,003$  g;

- la massa del campione e del piattino nei vari istanti temporali, eseguita su bilancia, errore  $\pm 0,005$  g.

Ogni valore di water uptake ( $w$ ) ottenuto ha quindi un errore ( $\Delta w$ ) che si valuta secondo la seguente formula:

$$w \pm \Delta w = \frac{(m \pm \Delta bil - (tara_{piattino} \pm \Delta bil)) - (m_{secca} \pm \Delta termbil)}{m_{secca} \pm \Delta termbil} \quad (3.1)$$

Raccogliendo insieme i termini sull'accuratezza, per giungere a una formulazione del tipo:  $c \pm \Delta c = \frac{a \pm \Delta a}{b \pm \Delta b}$ , in cui da (3.1)  $\Delta a = \pm 2 \cdot \Delta bil \pm \Delta termbil$  e  $\Delta b = \pm \Delta termbil$ , trascurando i termini di infinitesimo superiore in cui le accurattezze degli strumenti sono moltiplicate tra loro, si ottiene:

$$\pm \Delta w = \frac{\Delta a}{m_{secca}} + \frac{w \cdot \Delta b}{m_{secca}} \quad (3.2)$$

La barra di errore, dunque, varia in funzione di ciascuna misura.

### 3.2.3 RISULTATI OTTENUTI

Tutti i risultati sono riportati in modo esaustivo, completi di barra di errore, in appendice §A.3. *Test di adsorbimento dei materiali: dati sperimentali e modellazione*; di questi si richiamano nella presente sezione solo alcuni casi a titolo esemplificativo. Si riportano però in grafici più semplici e senza l'informazione sull'errore le curve di adsorbimento di tutti i casi analizzati, raggruppate per materiale e condizione di umidità relativa di equilibrio.

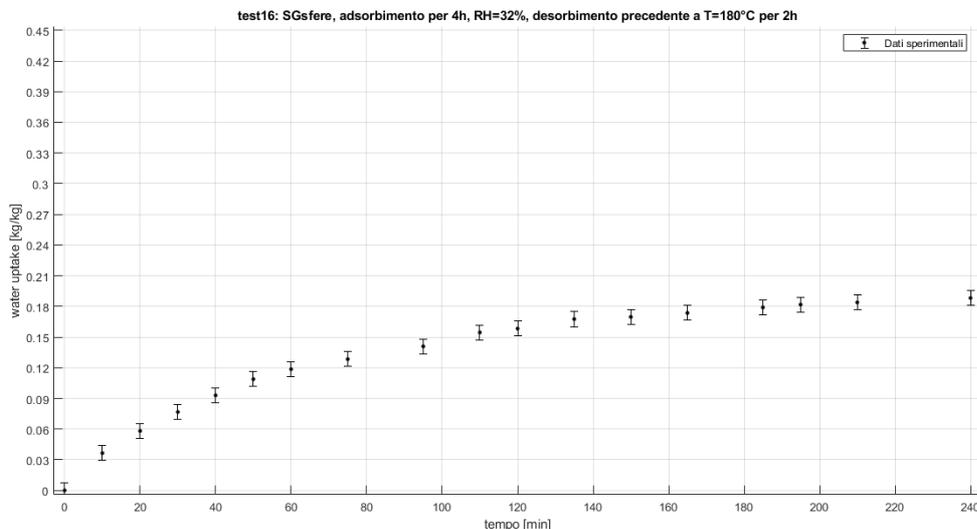


Figura 3.6: Curva adsorbimento silica gel in sfere, RH equilibrio 32 %, T ambiente 21 °C, T desorbimento precedente 180 °C

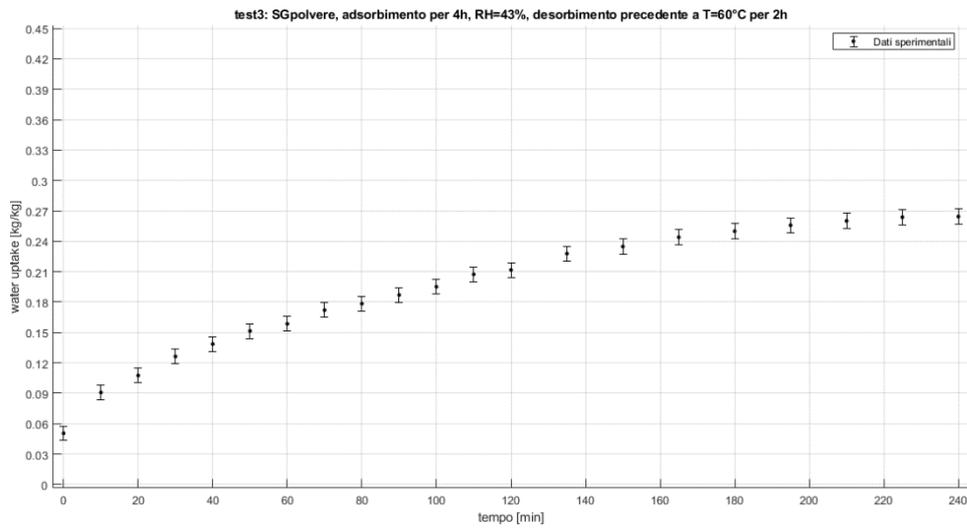


Figura 3.7: Curva adsorbimento silica gel in polvere, RH equilibrio 43 %, T ambiente 21 °C, T desorbimento precedente 60 °C

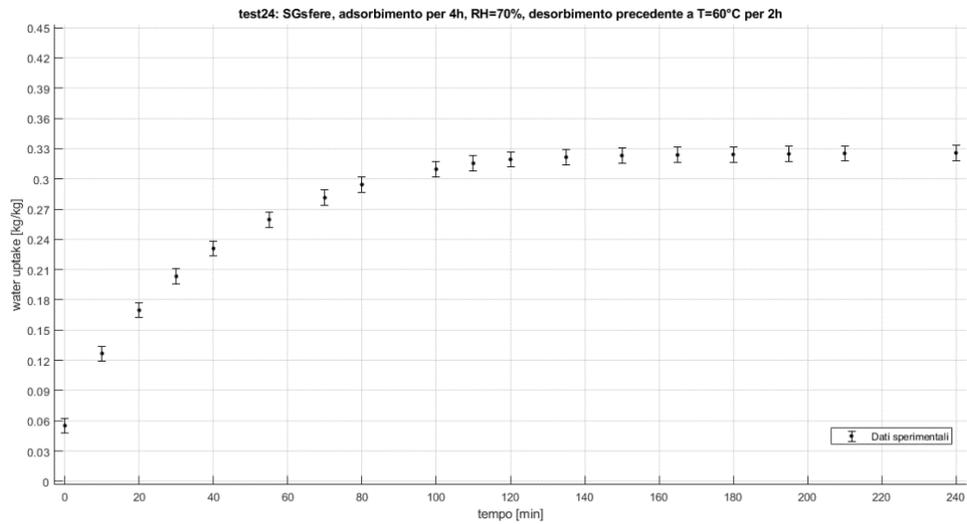


Figura 3.8: Curva adsorbimento silica gel in sfere, RH equilibrio 70%, T ambiente 21 °C, T desorbimento precedente 60 °C

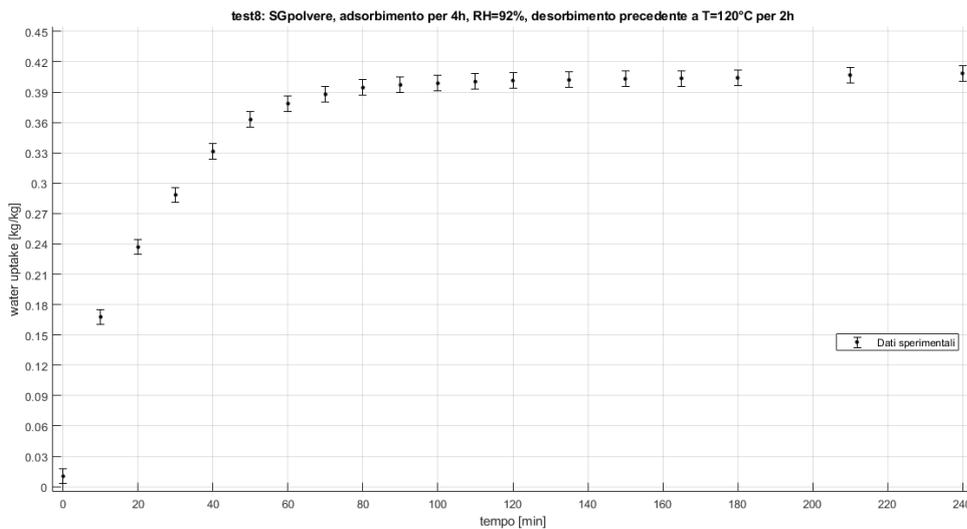
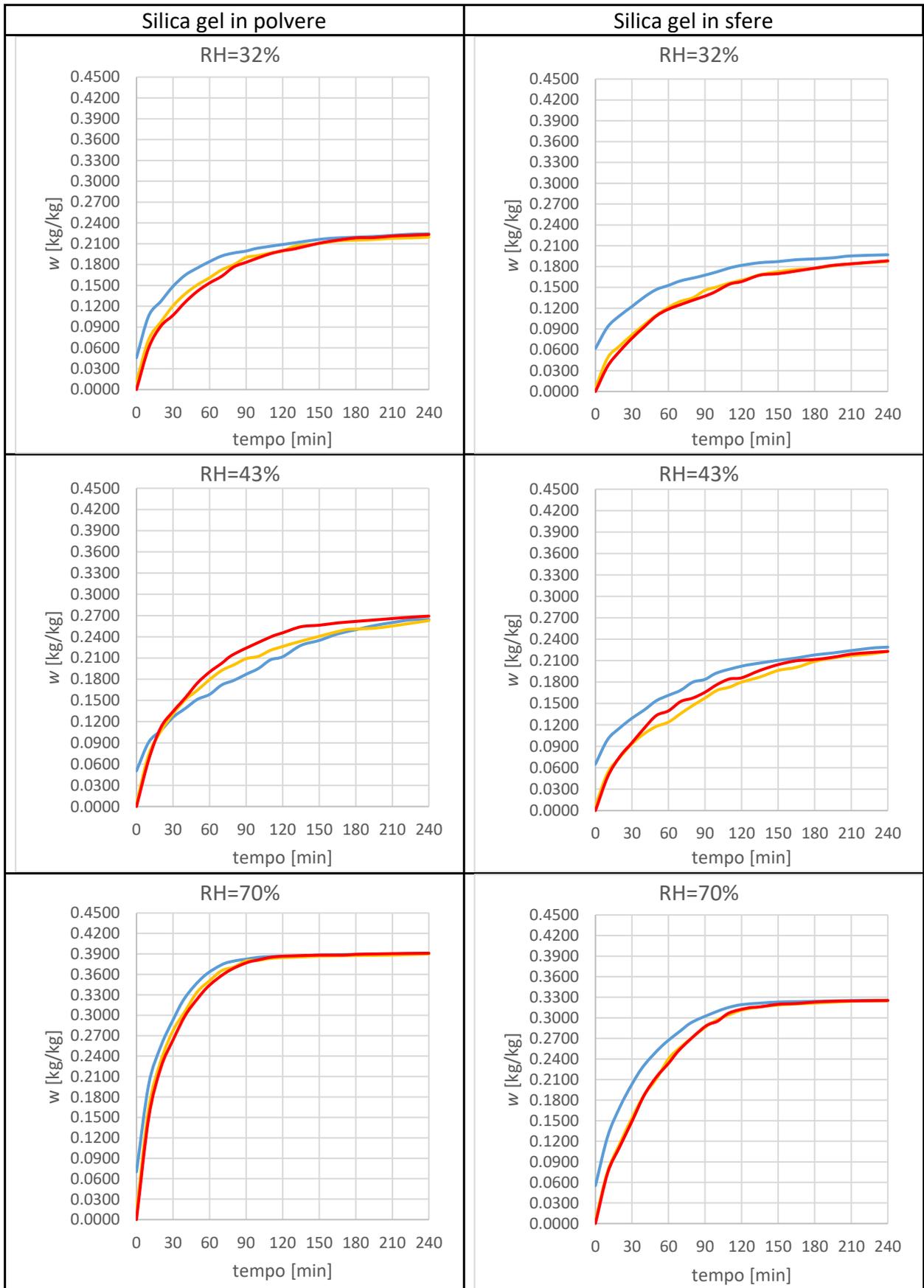


Figura 3.9: Curva adsorbimento silica gel in polvere, RH equilibrio 92 %, T ambiente 21 °C, T desorbimento precedente 120 °C



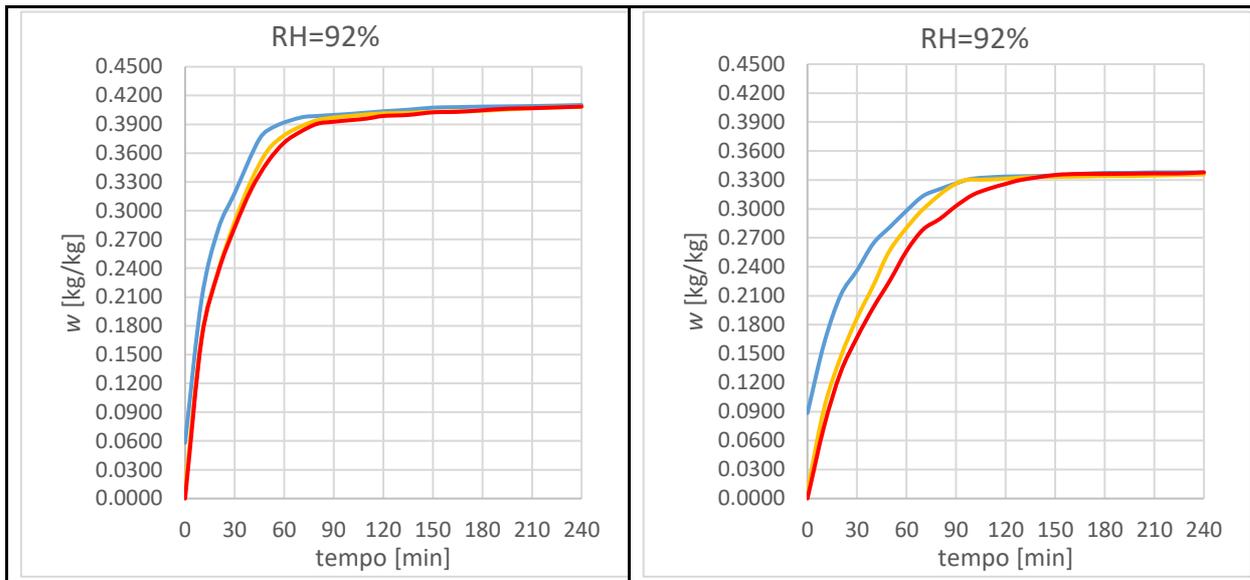


Tabella 3.1: Curve di adsorbimento di silica gel in polvere e in sfere con temperatura ambiente di 21 °C; in tutti i grafici la curva rossa fa riferimento al desorbimento precedente eseguito a 180 °C, quella gialla a 120 °C e quella azzurra a 60 °C

Dalla tabella si evince che, a parità di umidità relativa, la polvere raggiunge un water uptake di equilibrio maggiore rispetto alle sfere e il valore raggiunto aumenta all’aumentare dell’RH. Per quanto riguarda le diverse temperature della rigenerazione precedente all’adsorbimento, i valori di uptake raggiunti, trascorse le quattro ore, sono gli stessi ma è diversa la condizione di partenza: il materiale è più carico in partenza quanto più la temperatura di desorbimento è bassa. Ciò significa che tra la situazione iniziale e quella finale il materiale è in grado di trattenere più acqua se la temperatura di rigenerazione è più alta, a parità delle altre condizioni.

Nelle tabelle seguenti si riassumono condizioni di equilibrio e iniziali del water uptake.

<b>W<sub>equilibrio</sub> [kg/kg]</b>	SG polvere	SG sfere
RH = 32 %	0,2470	0,2046
RH = 43 %	0,2950	0,2583
RH = 70 %	0,3926	0,3263
RH = 92 %	0,4161	0,3395

Tabella 3.2: Condizioni di water uptake all'equilibrio per una temperatura di test di 21 °C in adsorbimento

<b>W<sub>iniziale</sub> [kg/kg]</b>	SG polvere			SG sfere			
	T <sub>desorbimento</sub> [°C]	60	120	180	60	120	180
RH = 32 %		0,0459	0,0113	0	0,0621	0,0055	0
RH = 43 %		0,0505	0,0108	0	0,0886	0,0141	0
RH = 70 %		0,0702	0,0114	0	0,0553	0,0055	0
RH = 92 %		0,0581	0,0104	0	0,0886	0,0087	0

Tabella 3.3: Condizioni di water uptake iniziali in funzione di materiale, umidità relativa e temperatura di rigenerazione precedente all'adsorbimento

### 3.3 Test di desorbimento

I test di desorbimento sono stati svolti per il silica gel in polvere e in sfere a diverse temperature di rigenerazione (50 °C, 60 °C, 70 °C, 80 °C, 100 °C, 120 °C e 180 °C) e a partire da diverse condizioni di water uptake iniziale definite dalla condizione di umidità relativa a cui il campione è stato messo in equilibrio prima della rigenerazione.

La condizione di riferimento di massa secca per il calcolo del water uptake è anche in questo caso la massa del campione valutata dopo il desorbimento di due ore a 180 °C.

#### 3.3.1 PROCEDURA DEL TEST

Il test di desorbimento è stato svolto nel seguente modo.

- Dopo avere precedentemente tarato la termobilancia sulla massa del piattino del campione utilizzato, il campione di materiale viene inserito in un box a una definita umidità relativa in modo che raggiunga la sua condizione di equilibrio di water uptake per la specifica condizione di RH; la temperatura dell'ambiente a RH controllata è  $21 \pm 1$  °C. Il raggiungimento dell'equilibrio può richiedere parecchie ore.
- Raggiunto l'equilibrio, il materiale viene inserito nella termobilancia dove si effettua una rigenerazione di 2 ore a temperatura controllata.
- La termobilancia valuta ogni 5 secondi la variazione di massa del campione di materiale rispetto al dato iniziale all'istante zero.
- Il test viene eseguito per i due materiali, le sette temperature di rigenerazione e le quattro condizioni di umidità relativa (ovvero di water uptake iniziale).

#### 3.3.2 BARRA DI ERRORE

Così come per i test di adsorbimento, anche nel desorbimento i punti delle curve di water uptake ottenuti in funzione del tempo hanno una barra di errore dovuta all'accuratezza degli strumenti di misura e alla propagazione di tali accuratezze dato che la misura non è direttamente svolta sul water uptake.

Le misure affette da un errore sono:

- la variazione di massa del campione (e dunque la misura di massa) nei vari istanti temporali, eseguita su termobilancia, errore  $\pm 0,003$  g;

- la massa secca del campione a 180 °C, eseguita su termobilancia, errore  $\pm 0,003$  g.

Ogni valore di water uptake ( $w$ ) ottenuto ha quindi un errore ( $\Delta w$ ) che si valuta a partire dalla seguente formula:

$$w \pm \Delta w = \frac{(m \pm \Delta_{termobil}) - (m_{secca} \pm \Delta_{termobil})}{m_{secca} \pm \Delta_{termobil}} \quad (3.3)$$

Raccogliendo anche in questo caso i termini di incertezza per portare la formula nella forma:  $c \pm \Delta c = \frac{a \pm \Delta a}{b \pm \Delta b}$ , in cui da (3.3)  $\Delta a = \pm 2 \cdot \Delta_{termobil}$  e  $\Delta b = \pm \Delta_{termobil}$ , trascurando i termini di infinitesimo superiore in cui le accuratze degli strumenti sono moltiplicate tra loro, si ottiene:

$$\pm \Delta w = \frac{\Delta a}{m_{secca}} + \frac{w \cdot \Delta b}{m_{secca}} \quad (3.4)$$

Anche in rigenerazione, dunque, la barra di errore varia in funzione di ciascuna misura.

### 3.3.3 RISULTATI OTTENUTI

Tutti i risultati sono riportati in modo esaustivo, completi di barra di errore, in appendice §A.4. *Test di desorbimento dei materiali: dati sperimentali e modellazione*; di questi si richiamano in questa sezione solo alcuni casi a titolo esemplificativo. Si riportano però in grafici più semplici e senza l'informazione sull'errore le curve di desorbimento di tutti i casi analizzati, raggruppate per materiale e condizione di water uptake iniziale.

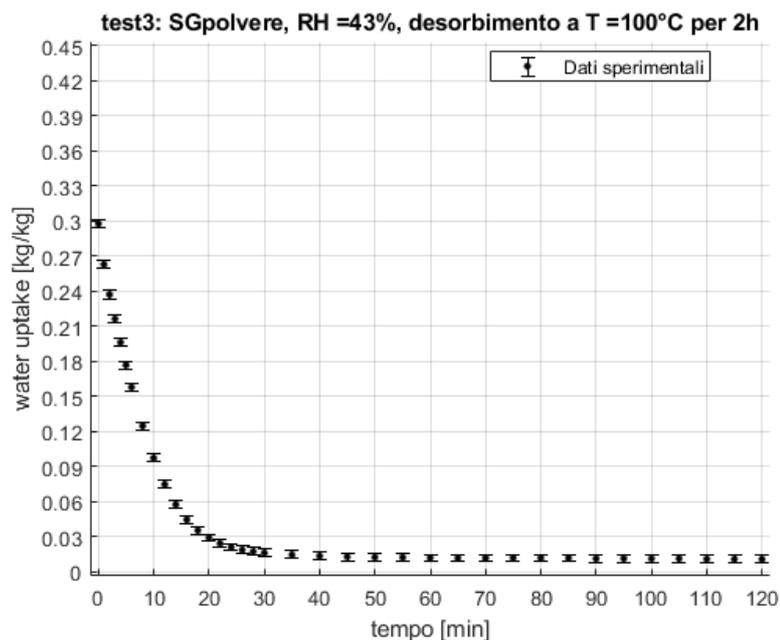


Figura 3.10: Test desorbimento polvere, T rigenerazione 100 °C per 2h, RH di equilibrio iniziale 43 %

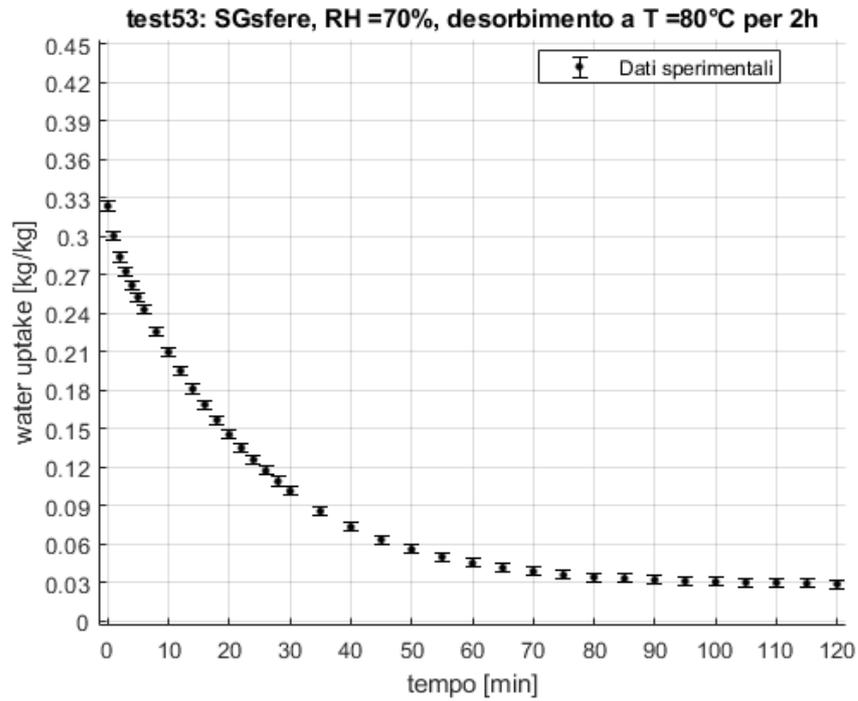


Figura 3.11: Test desorbimento sfere, T rigenerazione 80 °C per 2h, RH di equilibrio iniziale 70 %

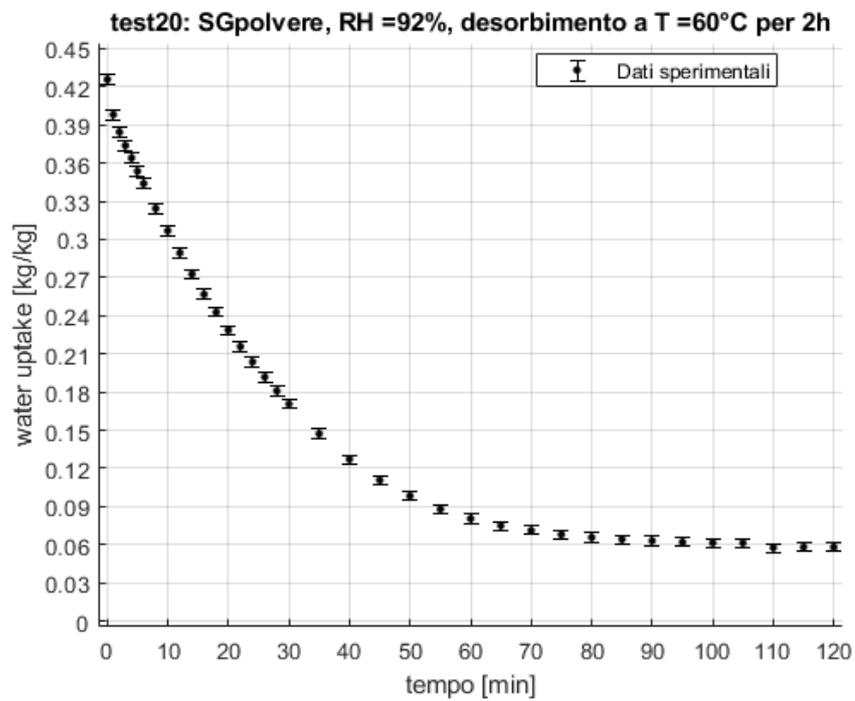


Figura 3.12: Test desorbimento polvere, T rigenerazione 60 °C per 2h, RH di equilibrio iniziale 92 %

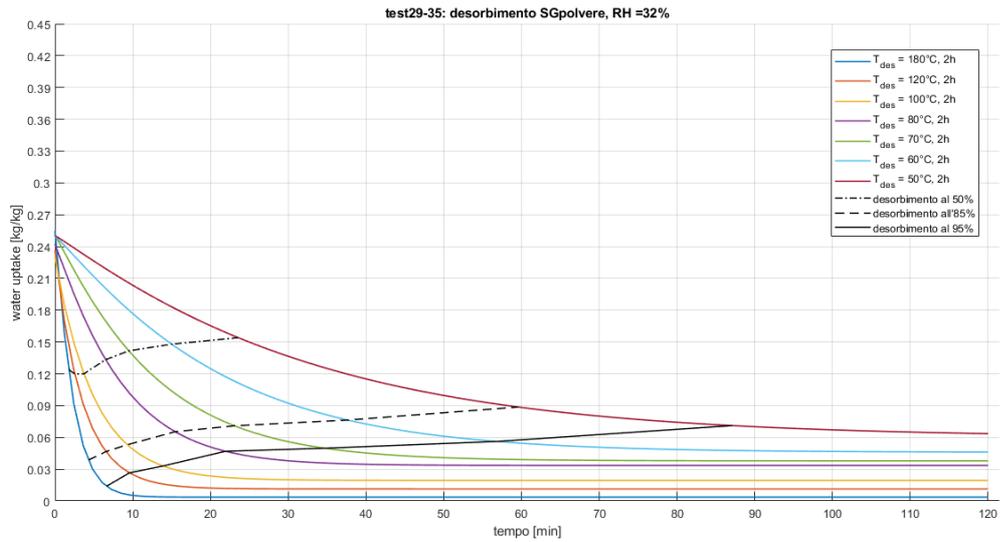


Figura 3.13: Desorbimento SG in polvere a diverse  $T$  di rigenerazione, water uptake iniziale raggiunto in equilibrio a RH 32 %

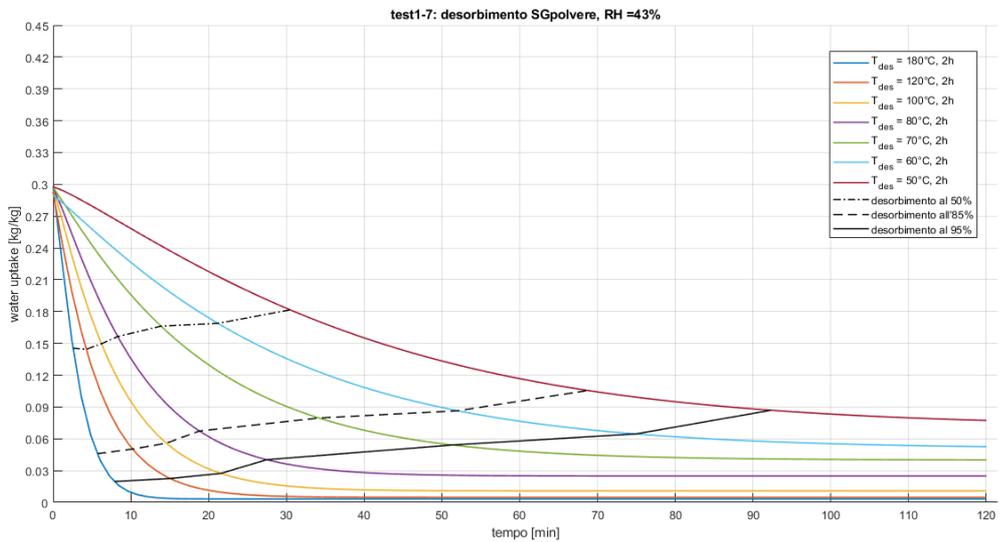


Figura 3.14: Desorbimento SG in polvere a diverse  $T$  di rigenerazione, water uptake iniziale raggiunto in equilibrio a RH 43 %

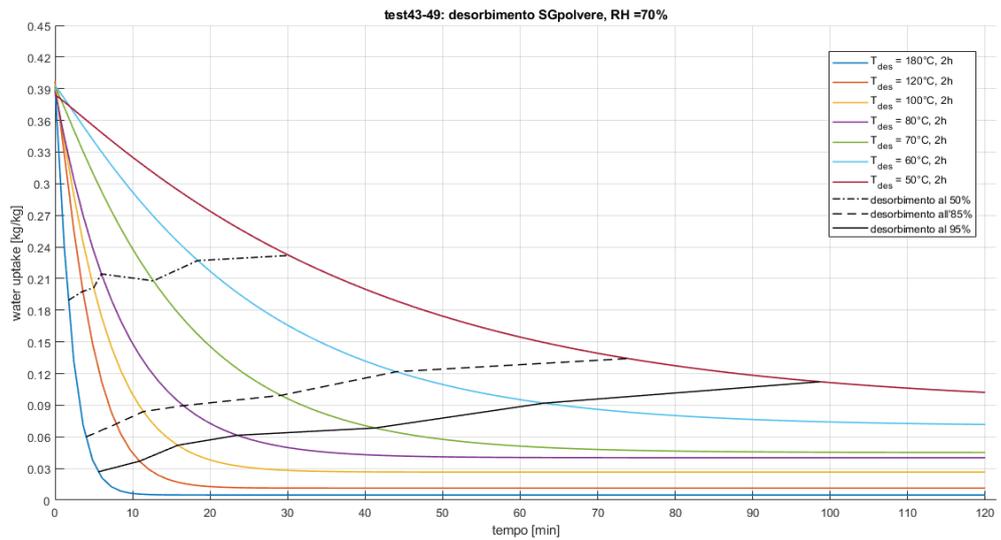


Figura 3.15: Desorbimento SG in polvere a diverse  $T$  di rigenerazione, water uptake iniziale raggiunto in equilibrio a RH 70 %

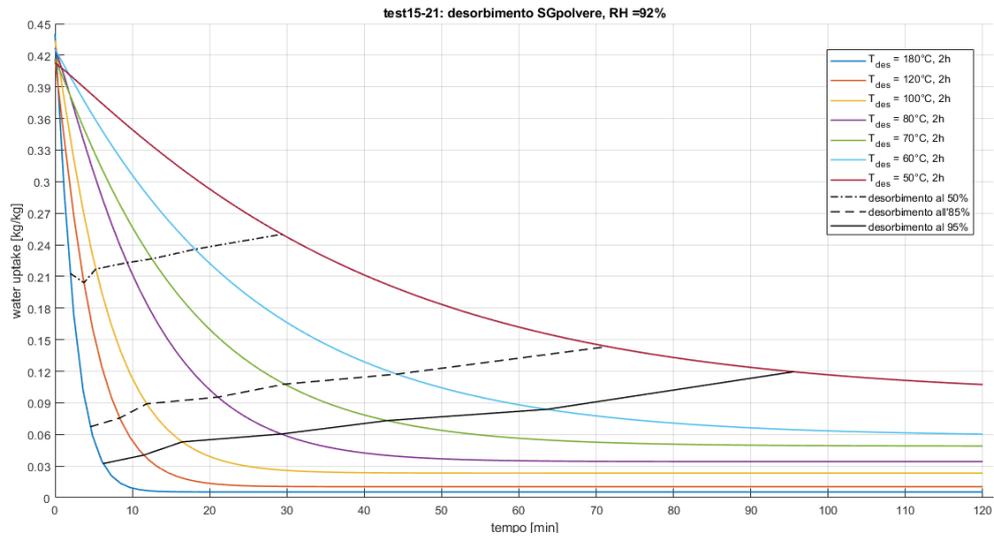


Figura 3.16: Desorbimento SG in polvere a diverse  $T$  di rigenerazione, water uptake iniziale raggiunto in equilibrio a RH 92 %

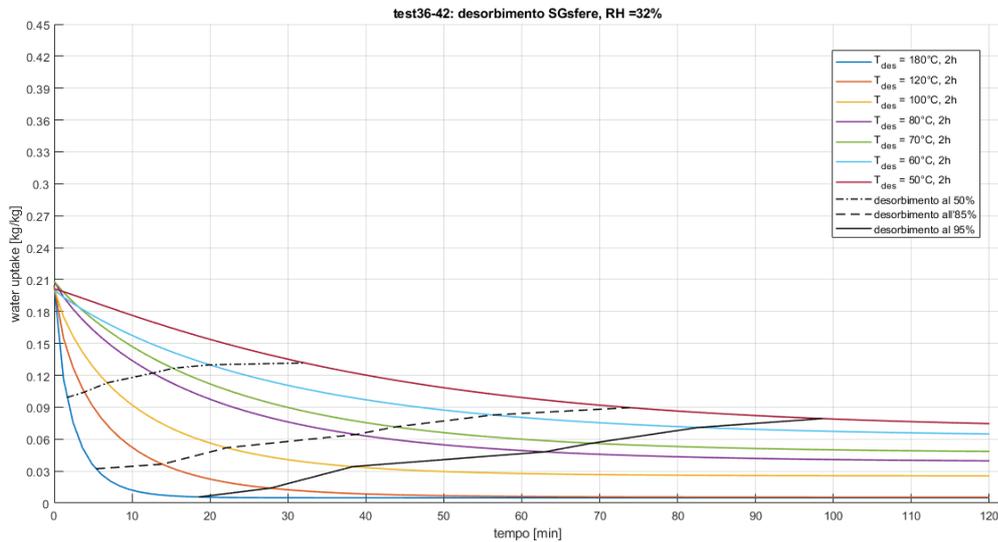


Figura 3.17: Desorbimento SG in sfere a diverse  $T$  di rigenerazione, water uptake iniziale raggiunto in equilibrio a RH 32 %

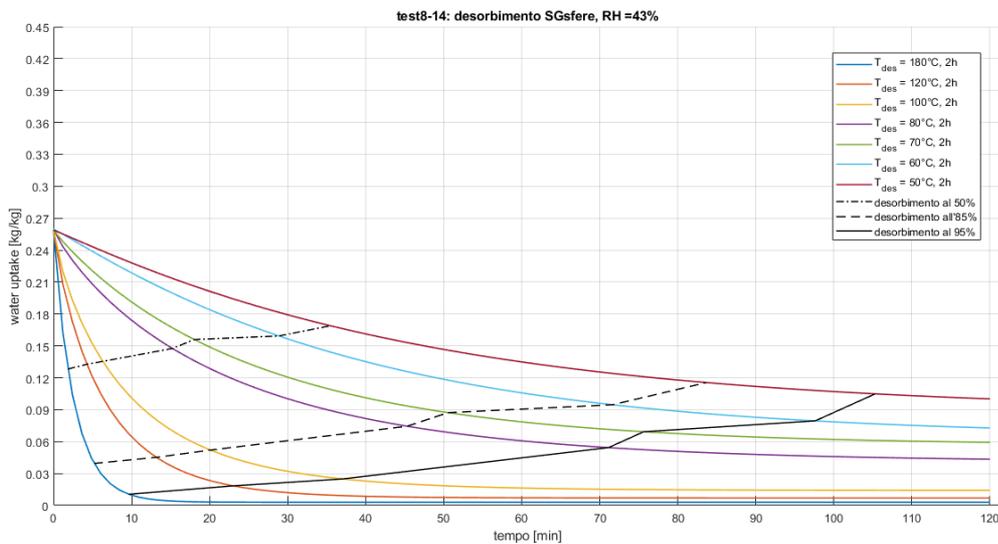


Figura 3.18: Desorbimento SG in sfere a diverse  $T$  di rigenerazione, water uptake iniziale raggiunto in equilibrio a RH 43 %

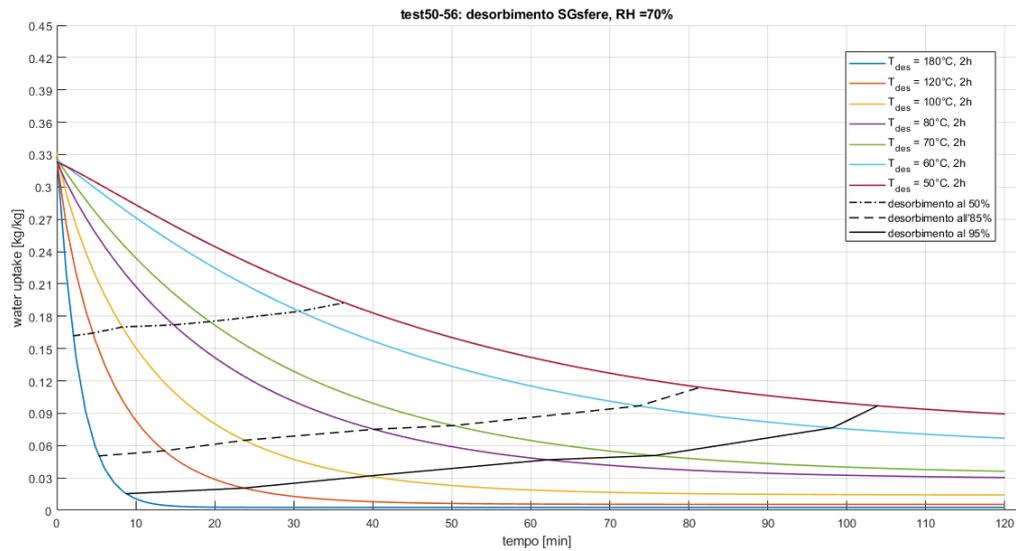


Figura 3.19: Desorbimento SG in sfere a diverse  $T$  di rigenerazione, water uptake iniziale raggiunto in equilibrio a RH 70 %

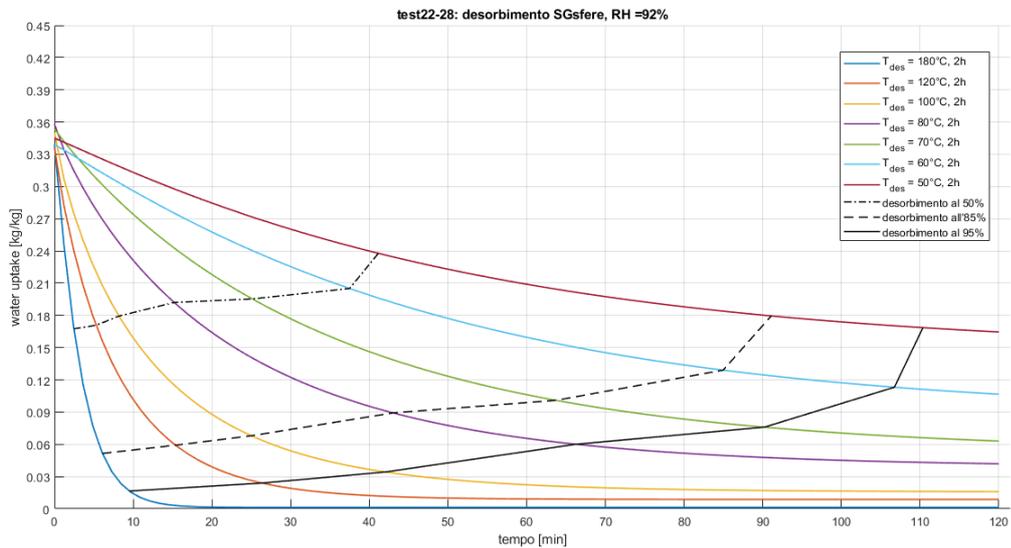


Figura 3.20: Desorbimento SG in sfere a diverse  $T$  di rigenerazione, water uptake iniziale raggiunto in equilibrio a RH 92 %

Si riassumono nelle seguenti tabelle le condizioni di water uptake iniziale e di equilibrio delle prove mostrate nelle immagini precedenti.

$w_{iniziale}$ [kg/kg]	SG polvere	SG sfere
RH = 32 %	0,2470	0,2046
RH = 43 %	0,2950	0,2583
RH = 70 %	0,3926	0,3263
RH = 92 %	0,4161	0,3395

Tabella 3.4: Condizioni di water uptake iniziale in desorbimento

<b>W<sub>equilibrio</sub> [kg/kg]</b>	<b>T<sub>desorbimento</sub> [°C]</b>	<b>w<sub>in</sub> a RH = 32 %</b>	<b>w<sub>in</sub> a RH = 43 %</b>	<b>w<sub>in</sub> a RH = 70 %</b>	<b>w<sub>in</sub> a RH = 92 %</b>
SG polvere	50	0,0600	0,0715	0,0897	0,0962
	60	0,0459	0,0505	0,0702	0,0581
	70	0,0378	0,0398	0,0451	0,0489
	80	0,0335	0,0248	0,0402	0,0342
	100	0,0194	0,0108	0,0266	0,0233
	120	0,0113	0,0048	0,0114	0,0104
	180	0	0	0	0
SG sfere	50	0,0690	0,0886	0,0754	0,1467
	60	0,0621	0,0653	0,0553	0,0886
	70	0,0473	0,0565	0,0325	0,0527
	80	0,0386	0,0408	0,0287	0,0386
	100	0,0255	0,0141	0,0141	0,0157
	120	0,0055	0,0070	0,0055	0,0087
	180	0	0	0	0

Tabella 3.5: Condizioni di water uptake all'equilibrio, dopo una rigenerazione di 2h a diverse temperature e diversi water uptake iniziali

Le linee che tagliano le curve di desorbimento nelle figure precedenti (*Figura 3.13 ÷ Figura 3.20*) rappresentano quanta parte del desorbimento di quel test è stata compiuta rispetto alla condizione finale, raggiunta dopo le due ore dal campione in esame. In particolare, sono state riportate le curve di desorbimento completato al 50 %, 85 % e 95 %. Queste curve forniscono informazioni che possono essere utili per capire il tempo ideale di rigenerazione. Questo tempo non deve essere troppo breve, perché il materiale non risulti troppo carico d'acqua per il successivo adsorbimento, ma nemmeno protrarre troppo a lungo questo tempo potrebbe essere vantaggioso se la maggior parte del desorbimento è già avvenuta, come indicato dalle curve all'85 % o al 95 %.

## 4 MODELLAZIONE DEL MATERIALE

### 4.1 Scelta del modello

Una volta ottenuti i dati sperimentali per i due materiali e per le diverse condizioni di lavoro descritte, è possibile ricercare il modello che meglio approssima la curva reale, al fine di poter eseguire una successiva simulazione del comportamento del fenomeno. Sono stati individuati in letteratura tre modelli, che sono stati confrontati per scegliere il più efficace.

I tre modelli sono:

- Linear Driving Force (LDF) [47], [54]

$$w = w_{in} + \left( 1 - \exp \left( -F_0 \cdot \frac{D_{S0} \cdot \exp \left( -\frac{E_a}{R_u \cdot (T + 273)} \right) \cdot t}{R_p^2} \right) \right) \cdot (W - w_{in}) \quad (4.1)$$

- Linear Driving Force corretto (LDF corretto) [47]

$$w = w_{in} + \left( 1 - \exp \left( -F_0 \cdot \left( \frac{D_{S0} \cdot \exp \left( -\frac{E_a}{R_u \cdot (T + 273)} \right) \cdot t}{R_p^2} \right)^m \right) \right) \cdot (W - w_{in}) \quad (4.2)$$

- Fickian diffusion (FD) [19], [47]

$$w = w_{in} + \left( 1 - \left( \frac{6}{\pi^2} \cdot \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} \cdot \exp \left( -n^2 \cdot \pi^2 \cdot \frac{D_{S0} \cdot \exp \left( -\frac{E_a}{R_u \cdot (T + 273)} \right) \cdot t}{R_p^2} \right) \right) \right) \cdot (W - w_{in}) \quad (4.3)$$

In cui:

- $w$  è il water uptake all'istante  $t$ , [kg/kg];
- $w_{in}$  è il water uptake iniziale, [kg/kg];
- $F_0$  è il fattore correttivo geometrico ( $F_0 = 15$  per particelle sferiche), [-];
- $D_{S0}$  è la costante pre-esponenziale della diffusione, [m<sup>2</sup>/s];
- $E_a$  è l'energia di attivazione, [J/mol];
- $t$  è il tempo, [s];
- $R_u$  è la costante universale dei gas perfetti ( $R_u = 8,314 \text{ J/mol/K}$ );
- $T$  è la temperatura del processo, [°C];

- $R_p$  è il raggio medio delle particelle, [m];
- $W$  è il water uptake all'equilibrio, [kg/kg];
- $m$  è l'esponente correttivo, [-].

Nel codice MATLAB utilizzato per la modellazione, alcuni parametri dei modelli ( $D_{S0}, E_a, m$ ) sono stati ottimizzati grazie al metodo dei minimi quadrati e con tali risultati è stato valutato quale dei modelli avesse, globalmente e per tutti i casi, l'errore relativo più basso. L'errore è stato valutato nel seguente modo:

$$err_{rel} = \left| \frac{misura_{sperimentale} - valore_{modello}}{misura_{sperimentale}} \right| \quad (4.4)$$

Per un motivo analogo è stato anche costruito un diagramma per verificare la validità del modello. In tale grafico (*dati sperimentali - dati modello*) si può leggere di quanto il modello si scosti dai dati empirici; un risultato è valido se il modello oscilla in una banda di errore di circa il  $\pm 5\%$ .

Di seguito si riporta, a titolo esemplificativo, un caso analizzato. In appendice, §A.3. *Test di adsorbimento dei materiali: dati sperimentali e modellazione* e §A.4. *Test di desorbimento dei materiali: dati sperimentali e modellazione*, sono riportate tutte le figure che lo script restituisce (una per ogni situazione sperimentale studiata).

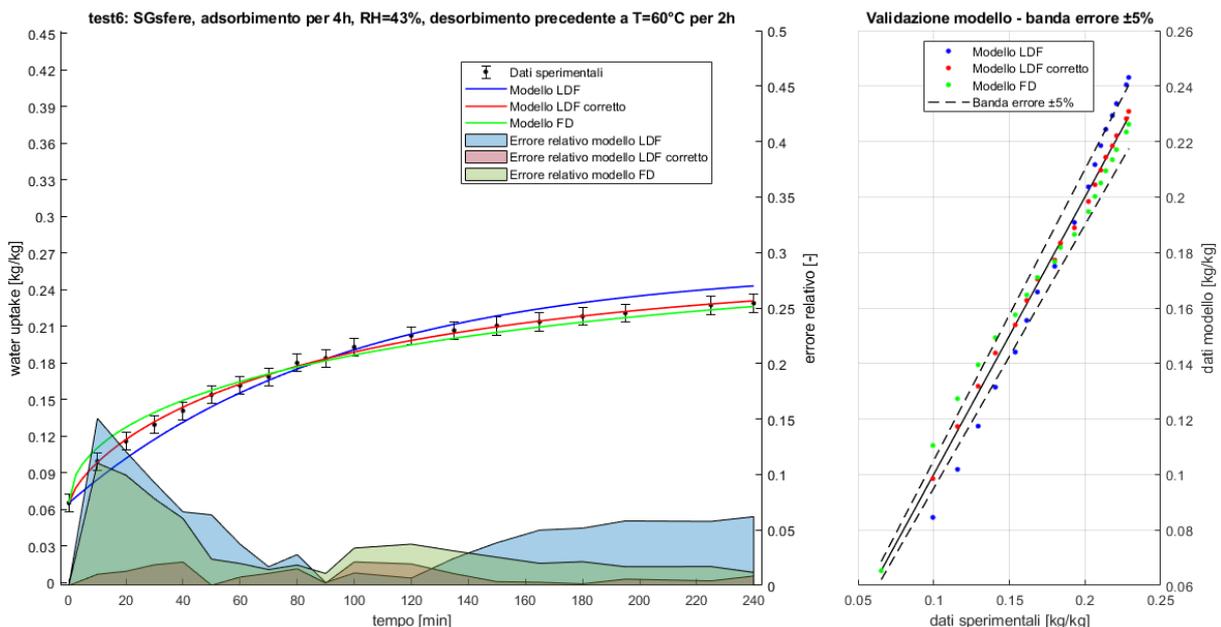


Figura 4.1: Dati sperimentali, modelli - Validazione modello

Nella *Figura 4.1* è riportato il caso di: silica gel in sfere, curva di adsorbimento per 4 h in ambiente a RH = 43 % e T = 21 °C, con desorbimento precedente di 2 h a 60 °C; si nota nella parte sinistra un diagramma *tempo - water uptake* in cui sono rappresentati i dati sperimentali e i tre modelli analizzati, a cui corrispondono nella parte bassa le aree colorate che rappresentano l'errore relativo di ciascun modello. Nella parte di destra invece è inserita la validazione del modello: nel grafico *dati sperimentali - dati modello* la bisettrice rappresenta i valori esatti e le curve tratteggiate delimitano la banda del  $\pm 5\%$ , al cui interno dovrebbero rimanere i punti del modello.

Si noti che per quanto riguarda il desorbimento a 180 °C è stato deciso di interrompere la modellazione dopo 20 minuti. Infatti, per tutti i casi studiati, il materiale era già rigenerato per più del 95 % e la valutazione dell'errore forniva risultati molto elevati a causa delle grandezze in gioco tendenti a zero, compromettendo la chiara visualizzazione dei risultati grafici. In ogni caso le considerazioni fatte precedentemente restano valide.

Un limite del modello LDF, largamente usato per simulare il comportamento del water uptake del silica gel, è che sottostima i dati reali in una prima fase e li sovrastima in una seconda (sia in adsorbimento, sia in desorbimento); così è stata proposta da El-Sharkawy [47] una correzione del modello tramite un esponente correttivo  $m$  a cui deve essere

elevato il tempo adimensionale  $\theta = \frac{D_{S0} \cdot \exp\left(-\frac{E_a}{R_u \cdot (T+273)}\right) \cdot t}{R_p^2}$ , come indicato nella formula (4.2). In

questa trattazione si è deciso di assumere come modello da utilizzare il modello Linear Driving Force con questa correzione (modello già in precedenza denominato LDF corretto). Infatti, si nota anche dal grafico precedente che l'area di errore rossa (LDF corretto) è la minore. Il discorso ovviamente nasce dal fatto che tale affermazione è vera prendendo in considerazione la totalità dei casi e facendo una valutazione media. Dunque, tale modello sarà utilizzato in seguito per fare simulazioni di calcolo.

Scelto il modello LDF corretto, sono state plottate le curve complete di desorbimento più adsorbimento e confrontate con i punti sperimentali per verificare graficamente la bontà del modello durante un ciclo completo. Inoltre, nel grafico riportato nella figura seguente è raffigurata anche la curva dell'umidità relativa durante la fase di adsorbimento. La curva

dell'umidità relativa mostra l'andamento con cui il sistema (e il materiale) torna verso la condizione di equilibrio al valore di RH dell'ambiente di adsorbimento. Tutti i casi valutati sperimentalmente che presentano sia una curva di desorbimento sia una di adsorbimento sono stati riportati in appendice §A.5. *Curve desorbimento e adsorbimento + umidità relativa dei materiali*; di seguito si riporta una sola immagine a titolo esemplificativo.

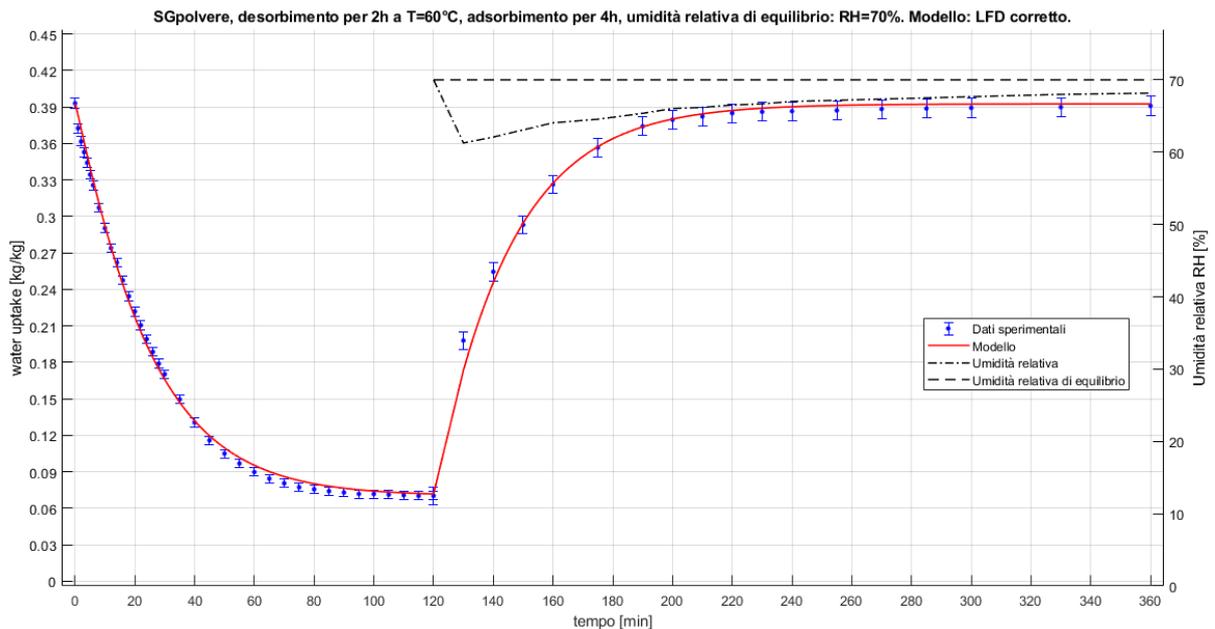


Figura 4.2: Curva desorbimento + adsorbimento per silica gel in polvere: desorbimento per 2 h a 60 °C e adsorbimento in ambiente a T = 21°C e RH = 70 % per 4 h, confronto dati sperimentali e modello; Curva umidità relativa: andamento dell'RH dell'ambiente di lavoro controllato durante la fase di adsorbimento, l'RH tende al valore di equilibrio (70 %) all'aumentare del tempo trascorso

## 4.2 Sensibilità del modello

Si svolge, una volta stabilito il modello, un'analisi parametrica per testarne la sensibilità: a partire da una configurazione iniziale ottenuta da valori standard dei parametri del modello, questi vengono fatti variare uno per volta per analizzare la risposta del modello, grazie ad un apposito script MATLAB.

I parametri standard iniziali utilizzati sono i seguenti:

- $R_u = 8,314 J/mol/K$ , costante universale;
- $F_0 = 15$ , fattore correttivo geometrico;

- $E_a = 42 \text{ kJ/mol}$ , energia di attivazione;
- $D_{S0} = 2,54 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$ , fattore pre-esponenziale della diffusione;
- $R_p = 10^{-3} \text{ m}$ , raggio medio delle particelle;
- $m = 1$ , esponente correttivo del tempo adimensionale;
- $w_{in,d} = 0,3 \text{ kg/kg}$ , water uptake iniziale di desorbimento;
- $T_d = 60 \text{ }^\circ\text{C}$ , temperatura di desorbimento;
- $t_d = 120 \text{ min}$ , tempo di desorbimento;
- $W_d = 0,05 \text{ kg/kg}$ , water uptake equilibrio di desorbimento;
- $w_{in,a} = 0,05 \text{ kg/kg}$ , water uptake iniziale di adsorbimento;
- $T_d = 20 \text{ }^\circ\text{C}$ , temperatura di adsorbimento;
- $t_d = 240 \text{ min}$ , tempo di adsorbimento;
- $W_d = 0,3 \text{ kg/kg}$ , water uptake equilibrio di adsorbimento.

Con questi dati si ottiene il seguente comportamento:

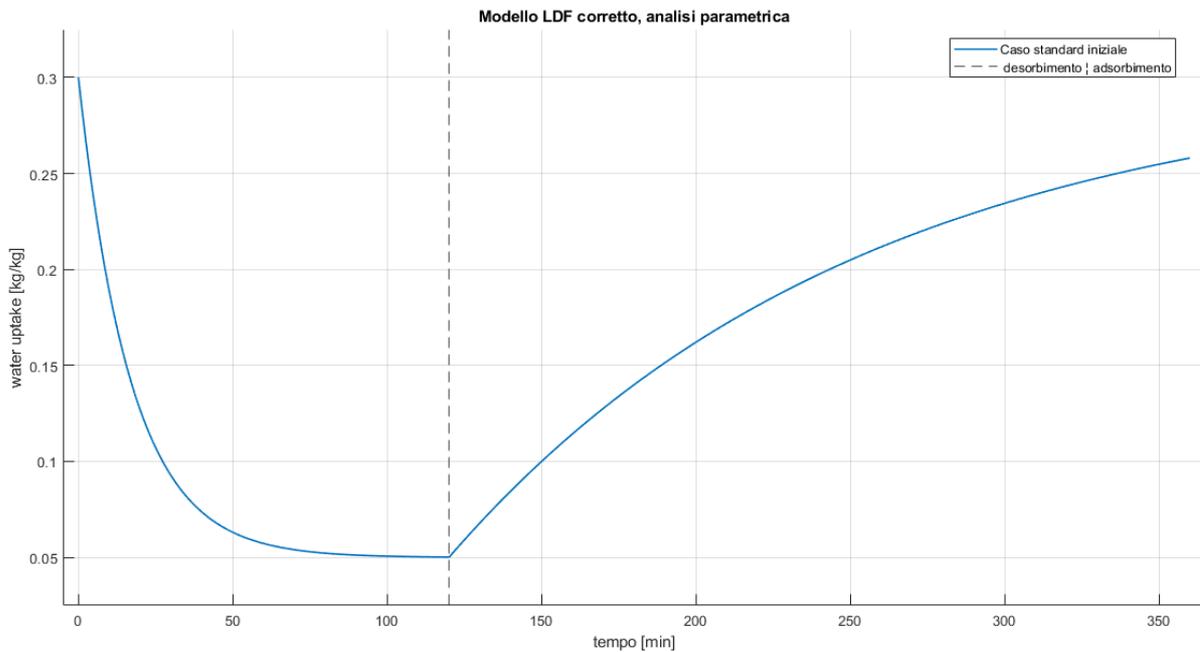


Figura 4.3: Caso standard iniziale per l'analisi parametrica di sensibilità

A partire da questa situazione iniziale vengono fatti variare uno ad uno i seguenti parametri:  $F_0$ ,  $D_{S0}$ ,  $E_a$ ,  $R_p$ ,  $m$  e  $T_{a/d}$ .

Due sono le situazioni che si possono verificare: all'aumentare del valore del parametro in esame il comportamento del materiale, ovvero il fenomeno di desorbimento o adsorbimento, diventa più rapido oppure più lento.

L'aumento dei parametri  $F_0$ ,  $D_{S0}$  e  $T_{a/d}$  accelera il fenomeno; ciò significa che, a parità di tempo trascorso, la quantità di acqua desorbita o adsorbita è maggiore al crescere del valore di tali parametri.

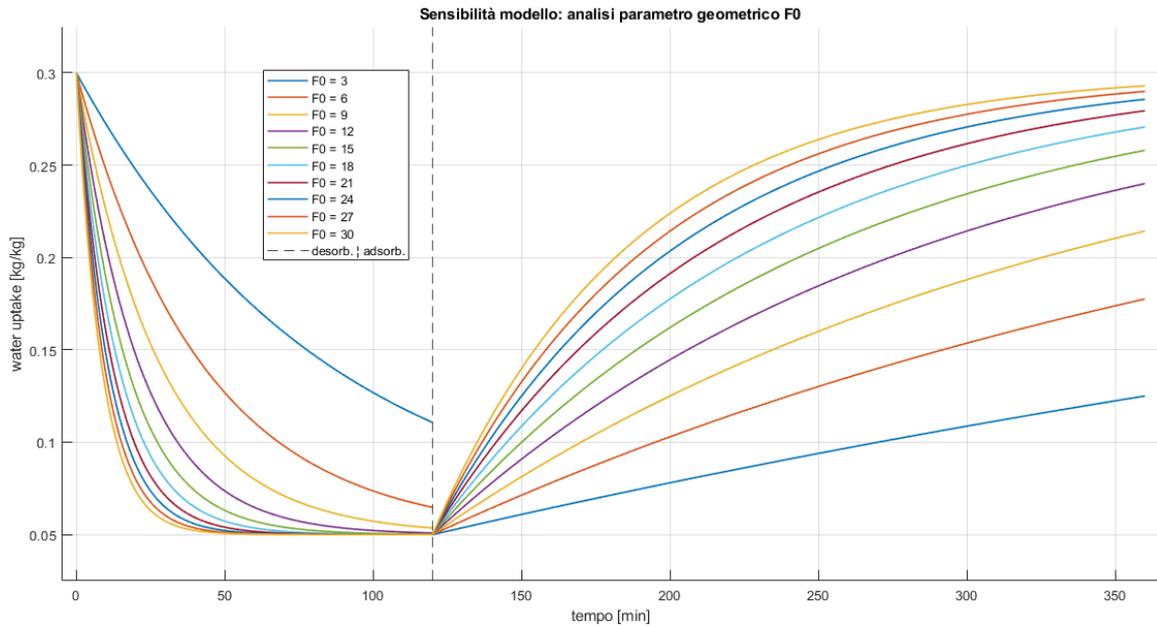


Figura 4.4: Analisi sensibilità parametro  $F_0$

Al crescere di  $F_0$  il desorbimento/adsorbimento è più rapido poiché il fattore geometrico racchiude un'informazione sulla superficie libera a parità di volume: se la superficie di scambio aumenta, è maggiore di conseguenza la velocità con cui il materiale si porta nella condizione di equilibrio.

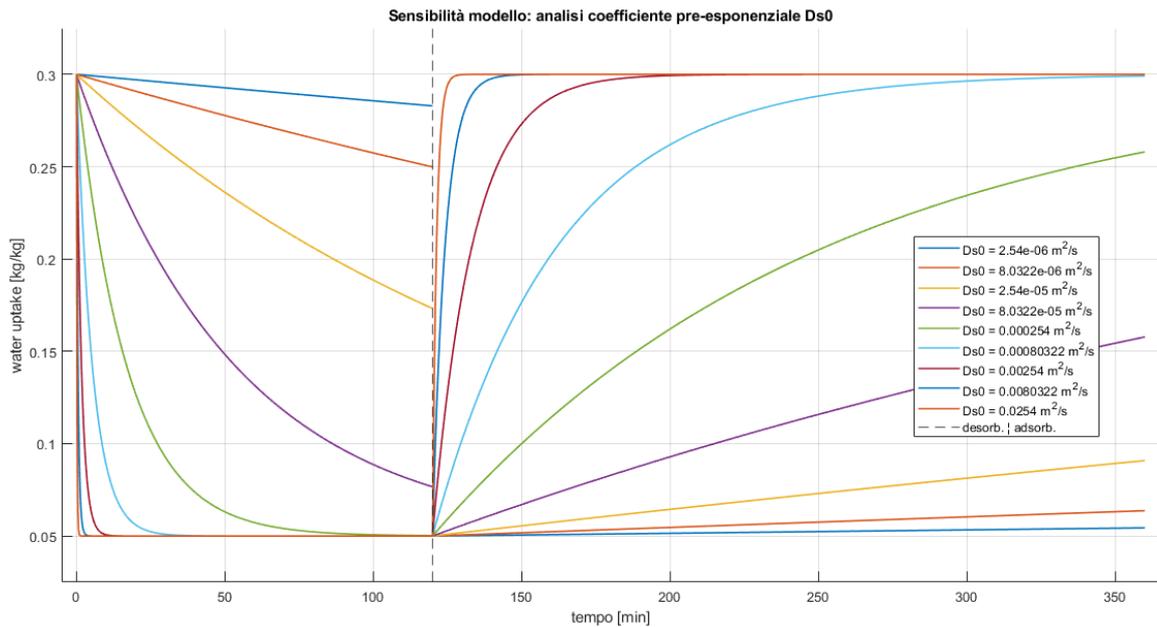


Figura 4.5: Analisi sensibilità parametro  $D_{S0}$

Il coefficiente pre-esponenziale della diffusione è direttamente proporzionale alla diffusione stessa, si veda l'espressione della formula (2.12a); dunque il suo aumento significa un aumento della diffusione e un fenomeno più rapido.

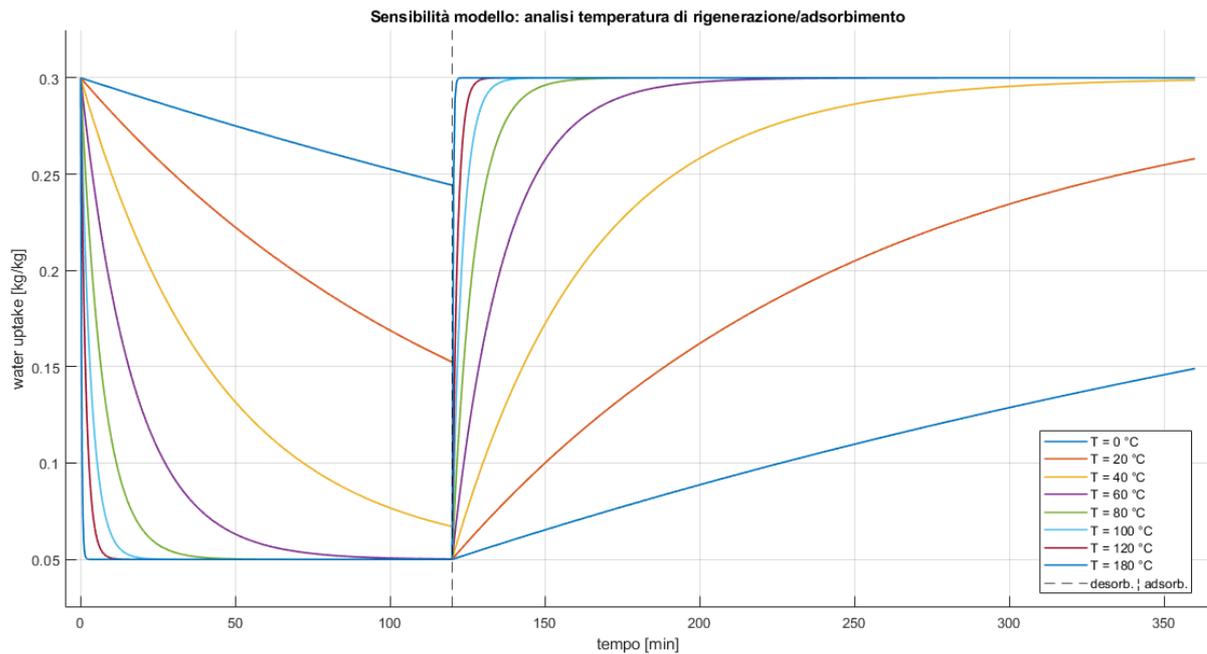


Figura 4.6: Analisi sensibilità parametro  $T_{d/a}$

Analogamente a quanto detto per i parametri precedenti, si verifica anche in questo caso che, se la temperatura a cui il fenomeno avviene è maggiore, maggiori saranno le interazioni tra molecole e il comportamento del materiale sarà più rapido. In questa analisi parametrica, però, non è stato tenuto in considerazione il fatto che alla temperatura sono strettamente legati i valori di water uptake all'equilibrio. Soprattutto in fase di adsorbimento non è del tutto realistica l'analisi proposta, poiché, all'aumentare della temperatura, l'equilibrio a cui il materiale si porta è significativamente più basso e in ogni caso non vengono realizzati adsorbimenti a temperature tanto maggiori rispetto alla temperatura ambiente. I desorbimenti invece si attuano a temperature almeno pari a 40 °C o superiori. Tuttavia, l'intento di un'analisi di sensibilità è quello di capire come si comporta un modello scelto al variare dei suoi parametri; in quest'ottica, dunque, si accetta il risultato ottenuto in *Figura 4.6*.

Viceversa, l'aumento dei parametri  $E_a$ ,  $R_p$  e  $m$  rallenta il fenomeno: a parità di tempo trascorso, al crescere di tali parametri la quantità di acqua desorbita o adsorbita è minore.

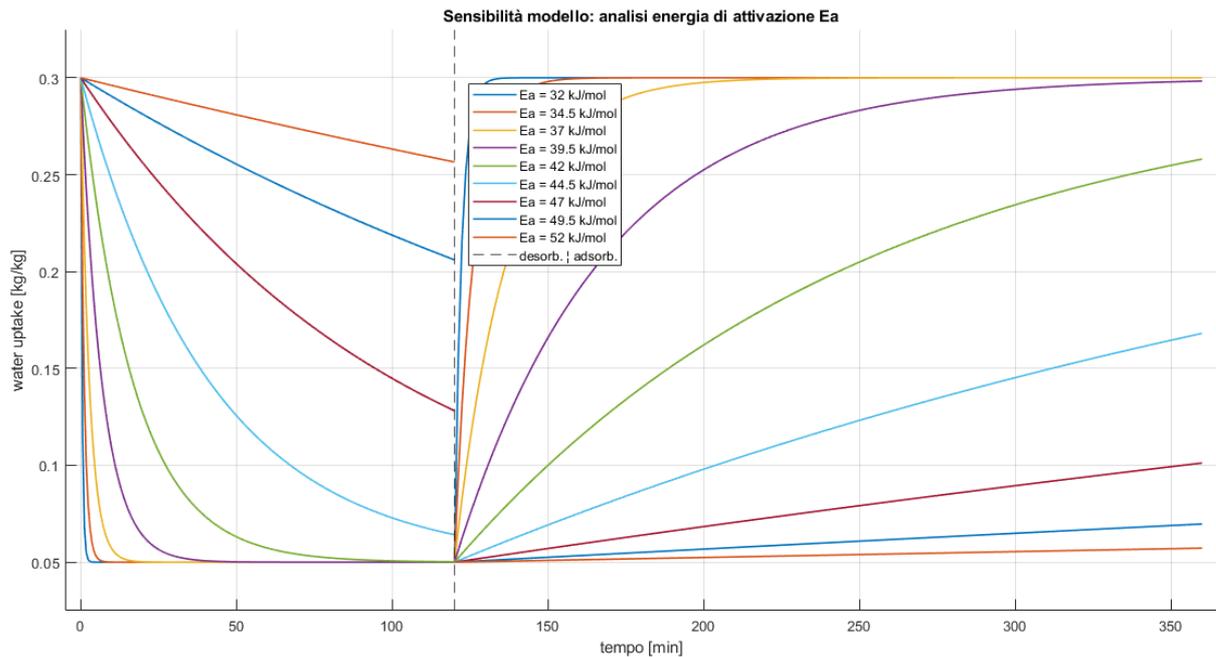


Figura 4.7: Analisi sensibilità parametro  $E_a$

Il fatto che l'aumento di  $E_a$  causi un rallentamento del fenomeno può trovare una spiegazione, oltre a quella analitica fornita dalla formula (2.12a), considerando che l'energia di attivazione è quell'energia di spunto di cui il fenomeno ha bisogno per poter iniziare. Dunque, se l'energia richiesta è maggiore, sarà più lungo il tempo necessario al completamento del processo; viceversa, se questo valore è più basso, il fenomeno inizierà più facilmente e, a parità di tempo trascorso, sarà più avanti. Ovviamente il valore richiesto come energia di attivazione è dovuto a ragioni chimico-fisiche del fenomeno stesso: per il gel di silice oscilla intorno al valore di  $42 \text{ kJ/mol}$  a seconda di temperatura, umidità e forma del materiale.

Il raggio delle particelle, invece, ha una spiegazione simile a quella fornita per il fattore di forma  $F_0$ . Infatti, se il raggio aumenta la superficie di scambio a parità di volume è minore e viceversa se il raggio diminuisce; di conseguenza il fenomeno sarà rispettivamente più lento o più rapido. Un altro effetto della variazione della dimensione della particella del materiale, di cui non è stato tenuto conto in questa analisi (Figura 4.8), è la variazione di water uptake di equilibrio, che è maggiore se le particelle sono più piccole (sempre a causa della superficie disponibile e della natura dell'adsorbimento). Tale comportamento si nota

anche nell'analisi sperimentale descritta nel capitolo precedente e le cui immagini sono riportate in appendice.

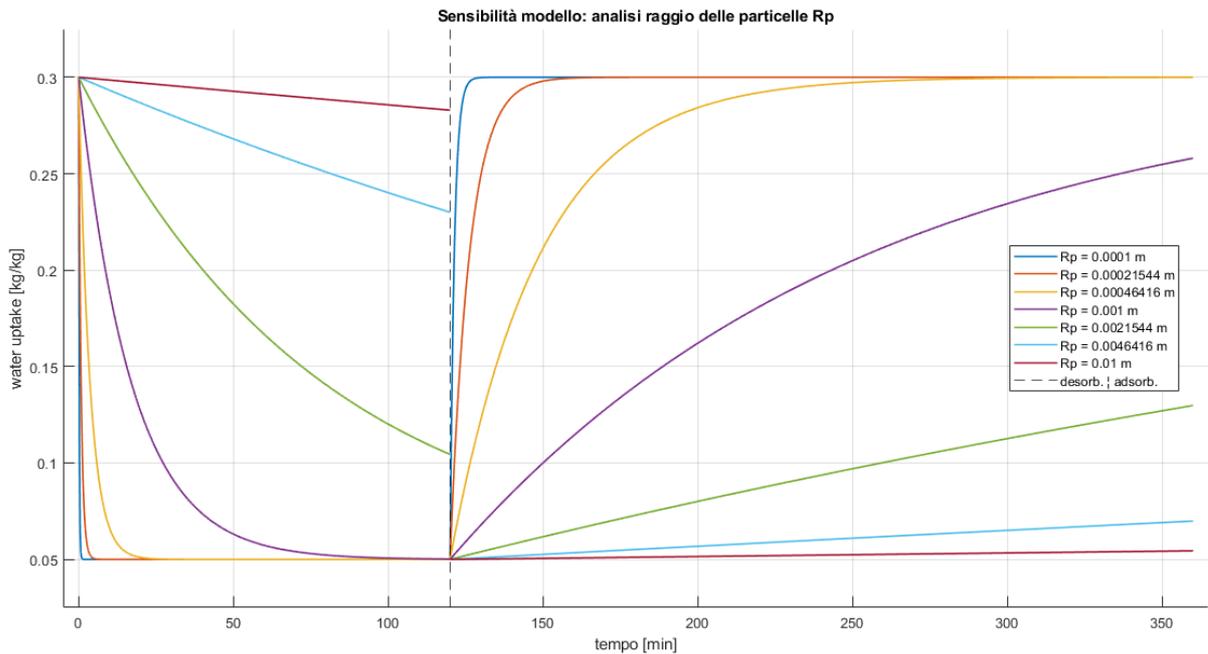


Figura 4.8: Analisi sensibilità parametro  $R_p$

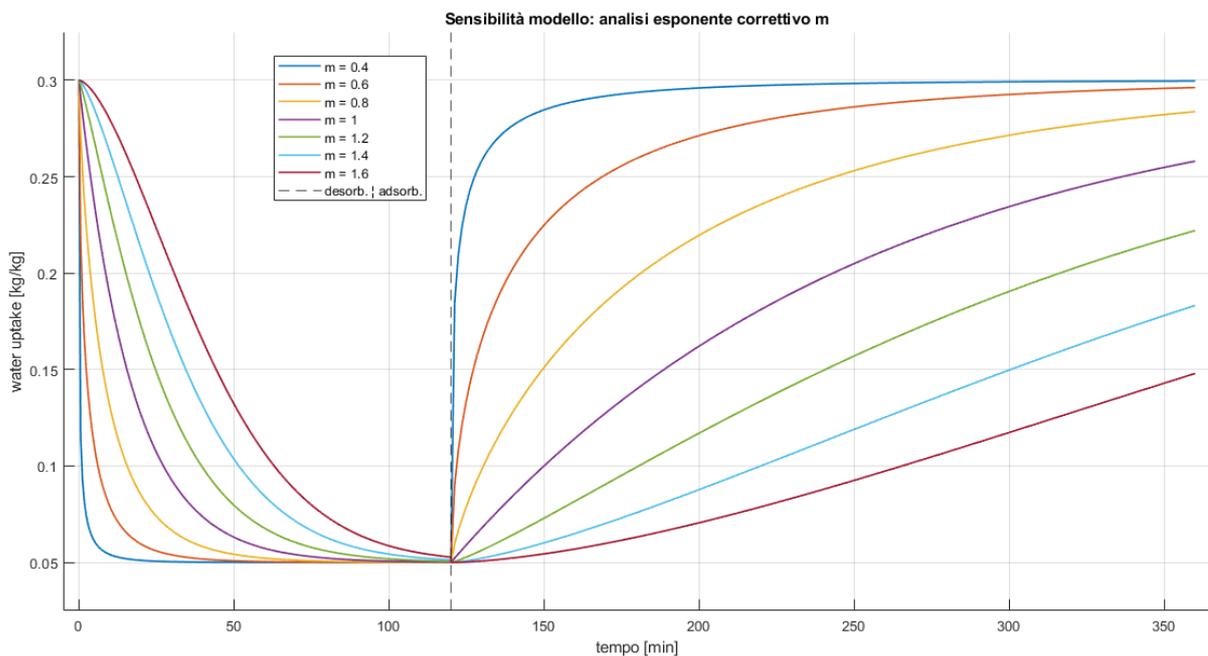


Figura 4.9: Analisi sensibilità parametro  $m$

Infine, per quanto riguarda l'esponente correttivo  $m$ , non è possibile dare una spiegazione, se non analitica, al motivo del comportamento del modello al variare del parametro. Infatti, il coefficiente  $m$  altro non è che un espediente matematico correttivo che

porta un miglioramento all'approssimazione che il modello attua nei confronti dei dati sperimentali.

### 4.3 Simulazione curve di adsorbimento del silica gel

Fissato il modello, è possibile procedere con una simulazione delle curve di adsorbimento per ipotizzare il comportamento dei materiali in condizioni di lavoro diverse da quelle sperimentali.

Lo scopo è fornire in input soltanto condizioni di temperatura e umidità relativa, tempi di adsorbimento e rigenerazione e lo stato iniziale del materiale per ottenere, tramite uno script MATLAB, curve che simulino l'andamento del water uptake nel materiale.

Il codice, riportato in appendice §A.6. *Script MATLAB, simulazione curve di adsorbimento e desorbimento*, simula, a partire da una situazione iniziale, prima un desorbimento e poi un adsorbimento. I dati richiesti come input sono i seguenti:

- tipologia di materiale: silica gel in polvere o in sfere;
- temperatura dell'ambiente in cui si trova il campione nella situazione di partenza;
- umidità relativa dell'ambiente in cui si trova il campione nella situazione di partenza;
- water uptake nella situazione iniziale del campione;
- temperatura di desorbimento;
- durata della fase di desorbimento;
- temperatura dell'ambiente di adsorbimento;
- umidità relativa dell'ambiente di adsorbimento;
- durata della fase di adsorbimento.

Il codice di simulazione delle curve utilizza il modello LDF corretto già presentato in equazione (4.2) ed è caratterizzato dai seguenti parametri fissi:

- coefficiente geometrico  $F_0 = 15$ ;
- costante universale  $R_u = 8,314 \text{ J}/(\text{mol}\cdot\text{K})$ ;
- raggio medio delle particelle  $R_p = [10^{-5}, 0.0016] \text{ m}$ , rispettivamente per silica gel in polvere e in sfere;

- coefficiente correttivo  $m$  che assume un valore fisso a parità di comportamento e tipologia del materiale. Ovvero il parametro  $m$  viene calcolato a partire dai dati sperimentali utilizzati in fase di modellazione e ne vengono ricavati quattro valori, due per la polvere e due per le sfere, dei quali uno per la fase di carica del materiale e l'altro per quella di scarico.

$m$ [-]	adsorbimento	desorbimento
SG polvere	0,8730	1,097
SG sfere	0,8791	0,9540

Tabella 4.1: Valori coefficiente  $m$

In primo luogo, il codice implementa alcune trasformazioni psicrometriche per determinare la condizione di umidità relativa del campione alla fine della trasformazione isotitolo di desorbimento. Si ricava l'equazione della pressione di vapore acqueo in funzione della temperatura, l'equazione per il calcolo del titolo e, a partire da queste, si determina l'umidità relativa finale. Le formule utilizzate sono le seguenti, sotto l'ipotesi di pressione atmosferica,  $p_{atm} = 1,01325 \text{ bar}$ .

$$p_{sat} = \frac{6,108 \cdot 10^{\frac{7,5 \cdot T_{sat}}{T_{sat} + 273}}}{1000} \quad [bar] \quad (4.5)$$

$$x = \frac{0,622 \cdot \frac{RH}{100} \cdot p_{sat}}{p_{atm} - \frac{RH}{100} \cdot p_{sat}} \quad [-] \quad (4.6)$$

Invertendo, dunque, l'equazione (4.6) si può ricavare l'umidità relativa cercata.

Successivamente viene valutata la diffusione  $D_s$  dell'equazione (2.12a) fissando il valore dell'energia di attivazione  $E_a$  a  $42 \text{ kJ/mol}$  in base ai dati ottenuti dall'analisi sperimentale e trovati in letteratura [18], [19], [47], [48]. Il valore del coefficiente  $D_{s0}$  viene invece ottimizzato in base al materiale grazie al metodo dei minimi quadrati, partendo dai dati ricavati sperimentalmente. Infine, l'equazione di Arrhenius (2.12) viene corretta da un fattore correttivo adimensionale  $n$ , anch'esso ottimizzato con il metodo dei minimi quadrati.

Il modello utilizzato ha la seguente formulazione:

$$D_s(T) = D_{s0} \cdot \exp\left(\frac{E_a}{R_u \cdot (T + 273)}\right)^n \quad [m^2/s] \quad (4.7)$$

I due risultati ottenuti (SG polvere e sfere) sono riassunti nelle immagini sottostanti; inoltre è stata aggiunta una colorbar che mostra la dipendenza della diffusione in base al water uptake iniziale (tale informazione non è inclusa nel modello di Arrhenius).

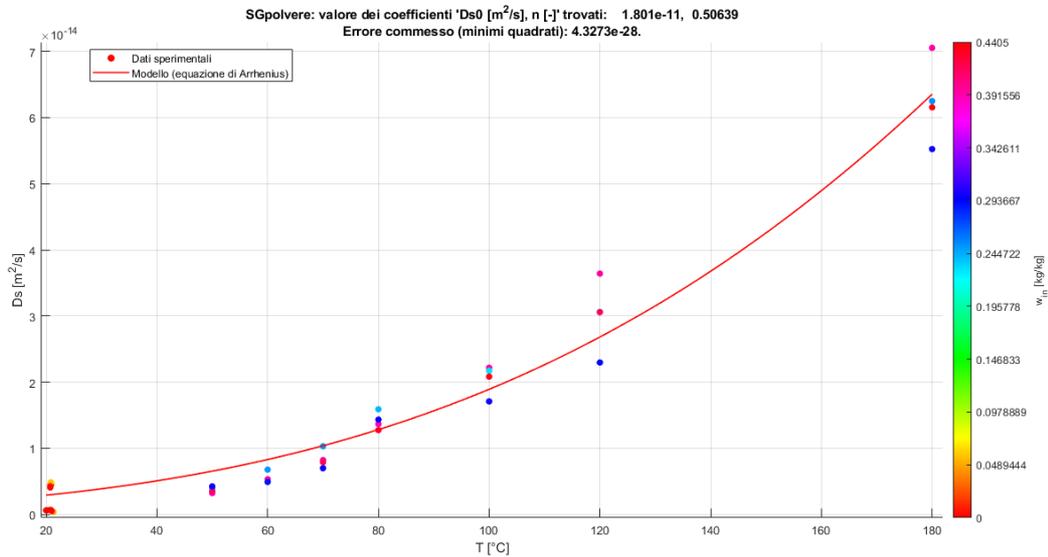


Figura 4.10: Modello  $D_s$  per SG in polvere

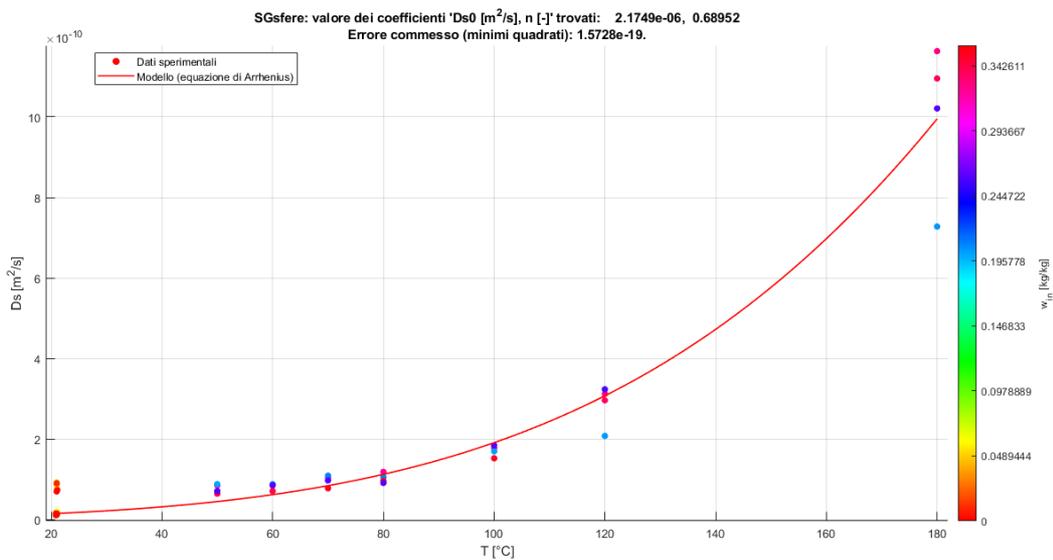


Figura 4.11: Modello  $D_s$  per SG in sfere

Riassumendo i parametri ottimizzati del modello di Arrhenius sono i seguenti:

	$D_{S0}$ [m <sup>2</sup> /s]	n [-]
SG polvere	$1,801 \cdot 10^{-11}$	0,5064
SG sfere	$2,175 \cdot 10^{-6}$	0,6895

Tabella 4.2: Parametri modello di Arrhenius per SG

Infine, sono state implementate analiticamente le curve isoterme dei materiali con cui determinare il water uptake all'equilibrio in funzione di temperatura e umidità relativa.

Si può, dunque, procedere alla simulazione di una curva di adsorbimento. Di seguito ne viene riportato un esempio, simulato a partire dai seguenti dati di input:

- tipologia di materiale: silica gel in polvere;
- temperatura dell'ambiente nella situazione di partenza: 20 °C;
- umidità relativa dell'ambiente nella situazione di partenza: 40 %;
- water uptake nella situazione iniziale del campione: 0,3 kg/kg;
- temperatura di desorbimento: 60 °C;
- durata della fase di desorbimento: 90 min;
- temperatura dell'ambiente di adsorbimento: 25 °C;
- umidità relativa dell'ambiente di adsorbimento: 70 %;
- durata della fase di adsorbimento: 180 min.

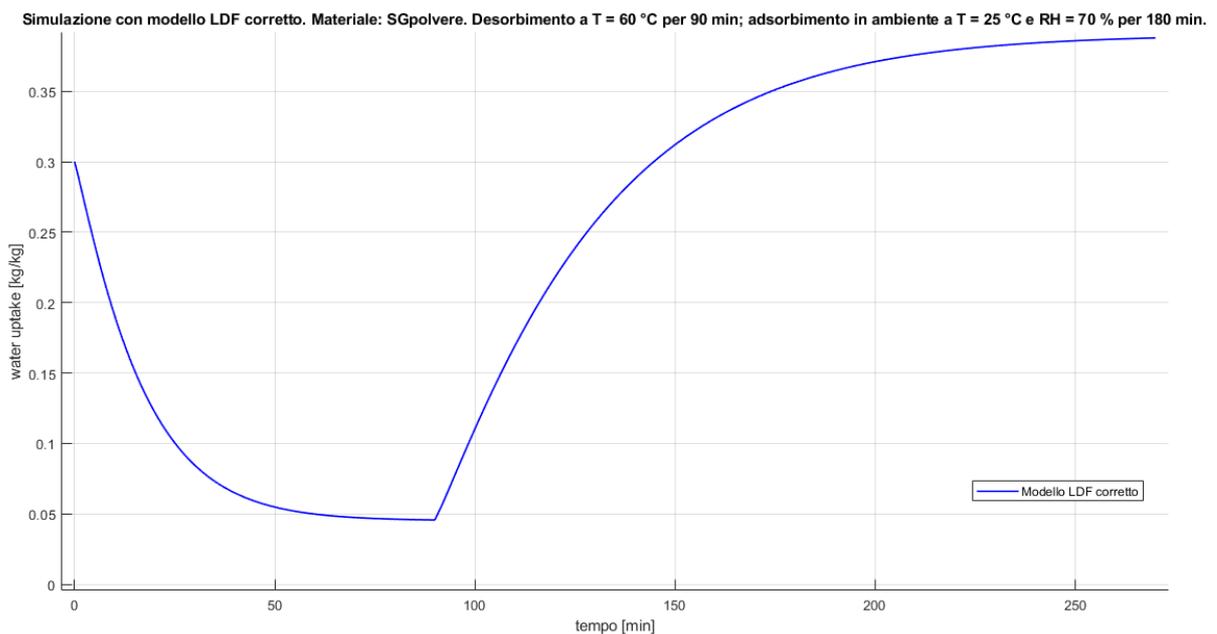


Figura 4.12: Esempio simulazione curva desorbimento e adsorbimento per silica gel

## 5 COATING

Noto il comportamento del silica gel in polvere, è stata sperimentata la tecnica di coating. Il coating è un rivestimento che viene eseguito su una superficie metallica e permette di far aderire il materiale adsorbente alla superficie. Ciò è utile ipotizzando di voler ricoprire uno scambiatore di calore alettato con un materiale adsorbente. Si immagina infatti di far transitare acqua all'interno dei tubi dello scambiatore, in modo da controllare la temperatura stessa del coating di silica gel e dunque decidere se far lavorare il materiale in adsorbimento o in rigenerazione e, allo stesso tempo, far circolare nel mantello l'aria da deumidificare o da umidificare per caricare o scaricare il materiale. Inserendo nel circuito almeno due scambiatori in parallelo è possibile far funzionare il sistema con continuità di servizio.

### 5.1 Ricetta del coating

Il coating viene creato come materiale composito, nel quale la matrice strutturale è costituita dal polimero polidimetilsilossano (PDMS) e il silica gel è inserito come seconda fase dispersa.

Il PDMS ha notevoli caratteristiche quali: buona stabilità termica, biocompatibilità, resistenza alla corrosione, basso costo, permeabilità ai gas ed inoltre è chimicamente inerte, semplice da maneggiare e manipolare e può sviluppare microstrutture. [55], [56]

Per ottenere la matrice di PDMS si miscelano due reagenti: *polymethylhydrosiloxane, trimethylsilyl terminated (RJ 202)* e *silanol terminated polydimethylsiloxane (RJ 107)*; le schede tecniche dei due reagenti sono riportate in appendice §A.7. *Safety data sheets dei materiali utilizzati nel coating* [57], [58].

Realizzata la matrice di PDMS, nel composto viene inserito il silica gel in polvere grazie all'aggiunta di etanolo con cui la soluzione viene diluita per facilitare la miscelazione dei componenti. Infine, ottenuto un composto omogeneo, si aggiunge il catalizzatore *Bis(neodecanoate)tin, tech-90* la cui scheda tecnica è riportata in §A.7. *Safety data sheets dei*

*materiali utilizzati nel coating* [59]; il catalizzatore attiva la reazione di reticolazione tra i due RJ e tale azione è irreversibile.

Durante il processo di miscelazione è bene avere alcune accortezze: il componente RJ 202 è il più viscoso ed è consigliabile pesarlo per primo; il catalizzatore può essere disciolto in etanolo prima di essere aggiunto al composto per facilitare la sua dispersione omogenea; l'etanolo ha una funzione fluidificante e rallenta la reazione di reticolazione, però il suo impiego non deve essere eccessivo poiché, per effettuare il percolamento sul metallo, la viscosità della soluzione deve essere quella di un "miele fluido"; è consigliabile aggiungere silice ed etanolo poco per volta, in modo da controllare l'esatta viscosità cercata; il composto deve sempre essere tenuto in movimento per garantire la sua omogeneità e, dopo l'aggiunta del catalizzatore, il coating deve essere realizzato entro dieci minuti.



Figura 5.1: Composto senza un'adeguata quantità di etanolo



Figura 5.2: Composto pronto per il percolamento

Prima di realizzare il coating è importante che le superfici metalliche siano state accuratamente pulite: la procedura ideale prevede un trattamento con soda per pulire a fondo ed eseguire un trattamento superficiale che, a processo ultimato, aumenti la resistenza del coating sulla superficie metallica. Nel caso in cui non sia possibile realizzare tale lavaggio in soda si può procedere con un accurato lavaggio in etanolo o alcol isopropilico ed eseguire un trattamento superficiale di tipo fisico con della cartavetro. Nel caso in esame è stata seguita la seconda procedura.

Inoltre, sono stati testati due metodi di miscelazione: un primo tentativo è stato eseguito con mescolamento manuale del composto, mentre un secondo è stato svolto per mezzo di un agitatore magnetico. Il risultato migliore è stato dato dal miscelamento tramite agitatore.



Figura 5.3: Catalizzatore disciolto in etanolo

Terminato il processo di percolamento sulla superficie da rivestire, il coating deve essere asciugato in forno, in modo da eliminare l'etanolo presente nel composto che non partecipa alla reazione, ma serve per ottenere la giusta viscosità per poter eseguire un corretto percolamento. La corretta quantità di etanolo varia tra il 90 % e il 115 % di silice gel (le percentuali fanno riferimento al peso). Infatti, una quantità troppo bassa di etanolo non rende il composto abbastanza fluido e una quantità troppo elevata causa alla fine del processo un alone umido nel coating, dovuto a dell'etanolo rimasto all'interno della matrice di PDMS. La fase di asciugatura dura dalle 24 alle 48 ore ad una temperatura compresa tra 60 °C e 80 °C.

Il risultato finale deve essere "ruvido" alla vista e al tatto e presentare microcavità.

Per tutto il processo è consigliabile indossare indumenti protettivi e posizionarsi sotto una cappa per evitare inalazioni delle micropolveri volatili che sono presenti nel gel di silice.

Le quantità teoriche dei componenti utilizzate nel processo di coating sono le seguenti:

- Silica gel in polvere: 67 %
- Polymethylhydrosiloxane, trimethylsilyl terminated (RJ 202): 20 %
- Silanol terminated polydimethylsiloxane (RJ 107): 10 %

- Bis(neodecanoate)tin, tech-90 (catalizzatore T9): 3 %
- Etanolo: 90 % di SG.

Le percentuali sono espresse in peso; le quantità effettive dei campioni prodotti possono variare di poco rispetto al valore ideale.

Durante questo studio i test di coating sono stati effettuati su piastrine di alluminio che hanno lo scopo di simulare l'alettatura di uno scambiatore di calore. Di seguito vengono mostrate le immagini di alcuni risultati ottenuti.



Figura 5.4: Alcuni campioni ottenuti (I)



Figura 5.5: Alcuni campioni ottenuti (II)

## 5.2 Test adsorbimento e rigenerazione del coating

I campioni prodotti vengono rigenerati a 80 °C e si eseguono test di adsorbimento a umidità relativa pari a 32 %, 43 %, 70 % e 92 %.

La massa secca, dunque, viene valutata a 80 °C; tale valore è utilizzato per valutare il water uptake dei campioni di coating. Per caratterizzare il sistema sono utili tre differenti definizioni di water uptake:

$$wt_1 = \frac{m_{H_2O}}{m_{secca} + m_{alluminio}} \quad [kg/kg] \quad (5.1)$$

$$wt_2 = \frac{m_{H_2O}}{m_{secca}} \quad [kg/kg] \quad (5.2)$$

$$wt_3 = \frac{m_{H_2O}}{m_{secca} \cdot \%SG_{stimata}} \quad [kg/kg] \quad (5.3)$$

In cui:

- $m_{H_2O}$  è la massa d'acqua nel campione;
- $m_{secca}$  è la massa del coating dopo rigenerazione a 80 °C;
- $m_{alluminio}$  è la massa della lamina di alluminio;
- $\%SG_{stimata}$  è la percentuale teorica di silica gel all'interno del composto coating.

Il dato espresso da  $wt_1$  riguarda nel complesso l'organo del sistema che adsorbe l'umidità (ad esempio lo scambiatore costituito da massa metallica e coating),  $wt_2$  riguarda il comportamento del coating e  $wt_3$  tiene conto soltanto della parte attiva del materiale. L'ultimo caso è il dato che può essere confrontato con i risultati ottenuti nella caratterizzazione del materiale puro; l'equazione (5.3) si basa sull'ipotesi di omogeneità di composizione del composto del coating.

Nel seguente grafico sono riportate le curve di adsorbimento eseguito per 4 ore a 21°C e un successivo desorbimento per 1 ora a 80 °C. Il water uptake riportato in questo grafico è il  $wt_2$ , ovvero viene considerata come massa secca (valutata ad 80 °C) sia la parte attiva sia

la parte inerte del coating. L'errore dei dati sperimentali dovuto agli strumenti di misura viene riportato nel paragrafo successivo.

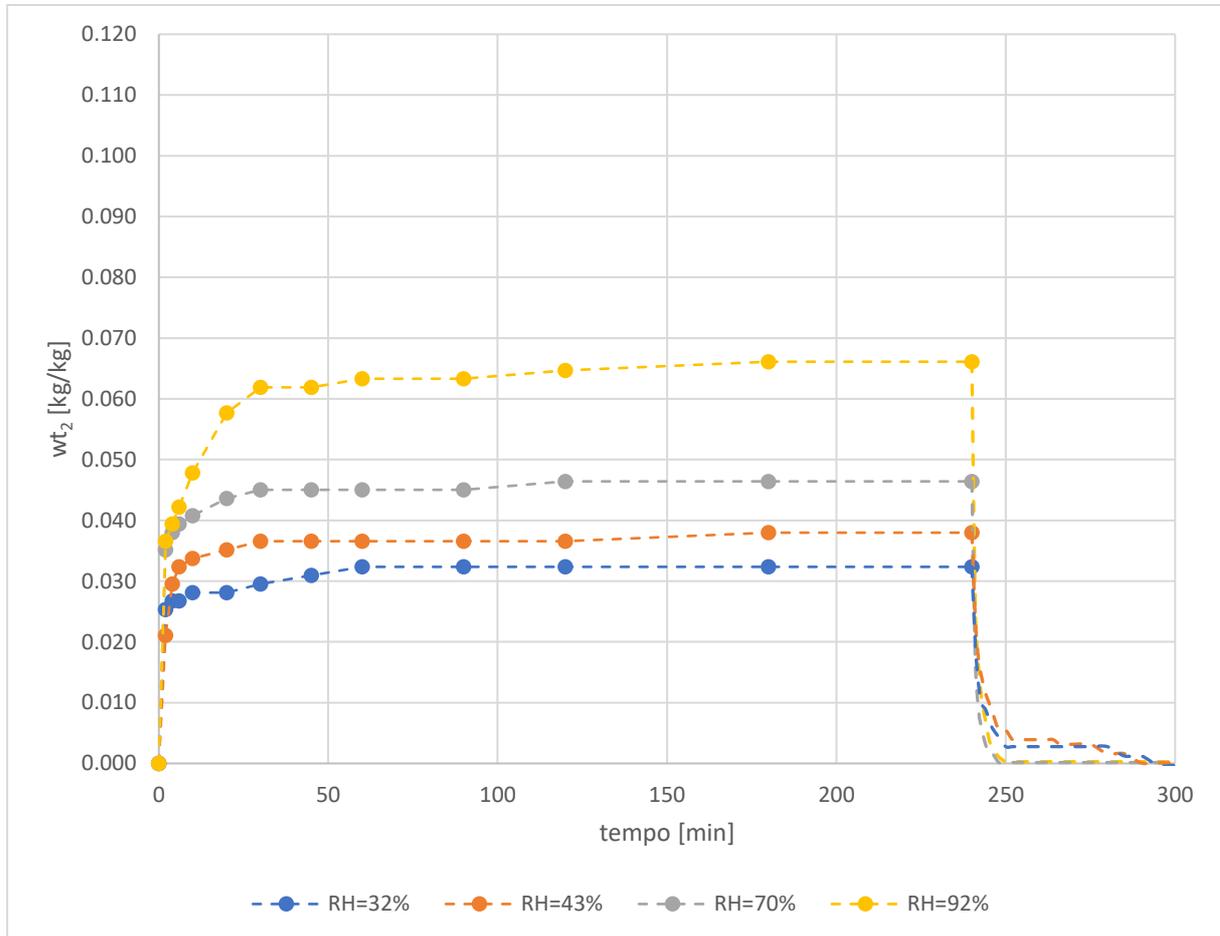


Figura 5.6: Adsorbimento e rigenerazione del coating al variare dell'umidità relativa dell'ambiente di adsorbimento

Nel grafico successivo viene invece eseguito il confronto fra le tre tipologie di water uptake precedentemente elencate. Il dato espresso da  $wt_1$  è un dato molto basso ma che può essere utile se si vuole conoscere come stia lavorando l'intero scambiatore di calore, in tale dato sono inclusi sia il materiale adsorbente sia la struttura metallica dello scambiatore vero e proprio. Il dato espresso da  $wt_3$  è quello che può essere confrontato con i valori ricavati dalla caratterizzazione del materiale puro.

In figura viene schematizzato il comportamento di un campione quando si trova in un ambiente di adsorbimento che ha umidità relativa di equilibrio al 92 %; è riportata anche la variazione di RH all'interno della camera controllata; la durata dell'adsorbimento è 4 ore.

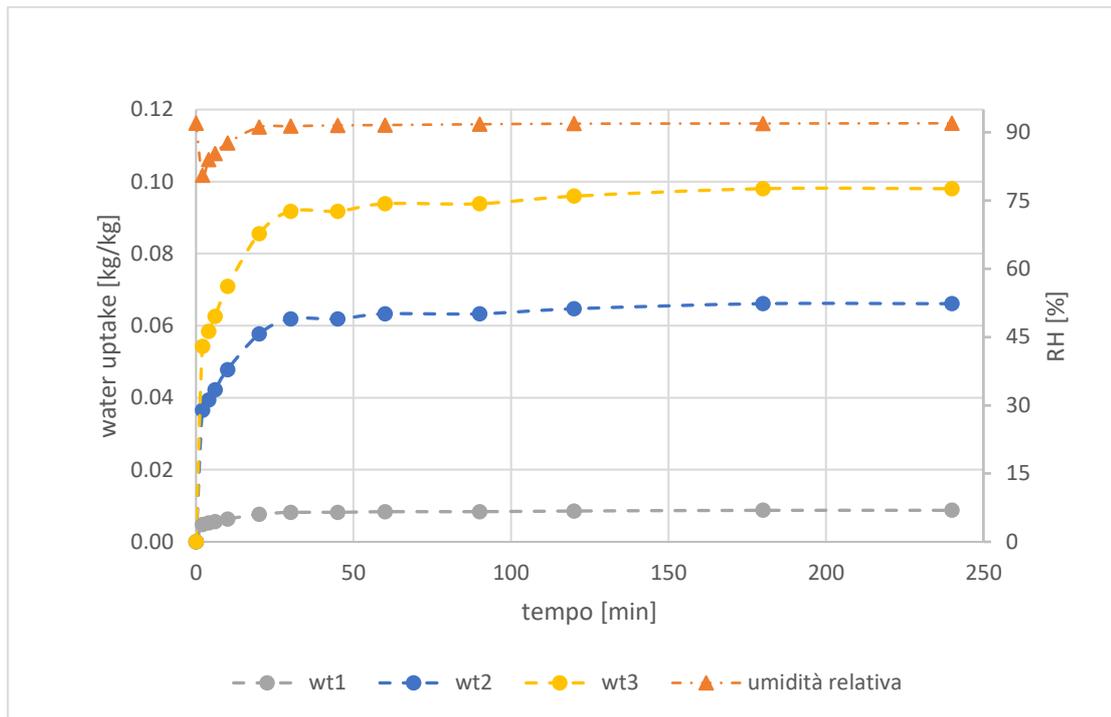


Figura 5.7: Confronto tra  $w_{t1}$ ,  $w_{t2}$  e  $w_{t3}$  per un campione durante un adsorbimento di 4 h in un ambiente con RH di equilibrio pari al 92 %

Il valore di  $w_{t3}$  può essere confrontato con il materiale puro, ma a parità di massa secca con cui viene calcolato il water uptake. Nel capitolo precedente sulla caratterizzazione del materiale tale dato era espresso in funzione di una massa secca valutata a 180 °C; dunque, si riportano gli stessi dati riguardanti il silica gel in polvere, ma riscaldati con massa secca pesata a 80 °C, temperatura a cui è stato asciugato il coating, per ottenere dati confrontabili.

RH* [%]	$W_{SGpolvere}$ [kg/kg]	$w_{t3}$ [kg/kg]
32	0,2085	0,050
43	0,2609	0,060
70	0,3431	0,071
92	0,3766	0,098

Tabella 5.1: Confronto water uptake all'equilibrio tra silica gel in polvere e coating con massa secca valutata a 80 °C

Come si evince dalla tabella i dati di equilibrio del coating corrispondono a circa il 30 % dei valori di water uptake del materiale puro.

Gli andamenti, le immagini e i valori riportati precedentemente sono basati su campioni di coating, le cui percentuali teoriche in massa sono riportate nel paragrafo precedente e i cui valori effettivi si elencano nella seguente tabella:

Componente del coating	% in peso effettiva
SG	67,43 %
RJ 202	19,70 %
RJ 107	9,85 %
Catalizzatore T9	3,01 %
Etanolo	93,4 % di SG

Tabella 5.2: Percentuale in peso effettiva dei componenti del coating

Le quantità assolute che invece sono in gioco nei test riportati in *Figura 5.6* e in *Figura 5.7* sono riassunte brevemente di seguito:

Massa di alluminio	4,664 ± 0,005	[g]
Spessore lamina di alluminio	0,5	[mm]
Superficie di coating	~ 2475	[mm <sup>2</sup> ]
Massa di coating (24h a 80°C)	0,725 ± 0,010	[g]
Spessore medio del coating	348	[μm]
% silica gel stimata	67,43	[%]
Massa di silica gel stimata	0,489	[g]

Tabella 5.3: Caratteristiche del coating analizzato

### 5.3 Modellazione del comportamento del coating

Come nel caso dei materiali puri, sono stati analizzati tre modelli: LDF, LDF corretto e FD, che rispettivamente sono formulati nelle equazioni (4.1), (4.2) e (4.3).

Il modello che meglio approssima il comportamento è, anche in questo caso, il modello LDF con il parametro correttivo  $m$ . In tale modello i parametri ottimizzati per mezzo del metodo dei minimi quadrati sono:

- $D_{S0}$  la costante pre-esponenziale della diffusione, [m<sup>2</sup>/s];
- $E_a$  l'energia di attivazione, [J/mol];
- $m$  l'esponente correttivo, [-].

Altri parametri invece sono mantenuti fissi:

- $R_u$  la costante universale ( $R_u = 8,314 \text{ J/mol/K}$ );
- $R_p$  il raggio medio delle particelle ( $R_p = 1 \cdot 10^{-5} \text{ m}$ );
- $F_0$  il fattore correttivo geometrico ( $F_0 = 15$ ), [-].

Altri parametri ancora sono funzione delle condizioni di test:

- $W$  il water uptake all'equilibrio, [kg/kg];
- $w_{in}$  il water uptake iniziale, [kg/kg];
- $t$  il tempo, [s];
- $w$  il water uptake all'istante  $t$ , [kg/kg];
- $T$  la temperatura del processo, [°C].

Nelle immagini seguenti sono riportati i dati sperimentali e le tre relative modellazioni. Inoltre, si riporta la banda di errore dovuta all'incertezza di misura per i dati sperimentali e l'errore relativo, valutato con la formula (4.4), per ogni modello. Si noti che in fase di rigenerazione la rappresentazione dell'errore relativo è stata arrestata dopo dodici minuti, poiché i numeri in gioco sono tendenti a zero e i valori restituiti dalla formula (4.4) perdono di significato. Nella parte destra delle seguenti immagini è riportato il grafico che valida i modelli indicando quanto si discostano dal dato sperimentale, sono mostrate bande di errore del  $\pm 5 \%$  e del  $\pm 10 \%$ .

Tutti i dati di water uptake, sia in adsorbimento sia in desorbimento, sono espressi in funzione della massa secca valutata a  $80 \text{ °C}$ . Gli ambienti di test sono:

- adsorbimento per 4 h a  $21 \text{ °C}$  e RH 32 %, 43 %, 70 %, 92 %;
- desorbimento per 1 h a  $80 \text{ °C}$ .

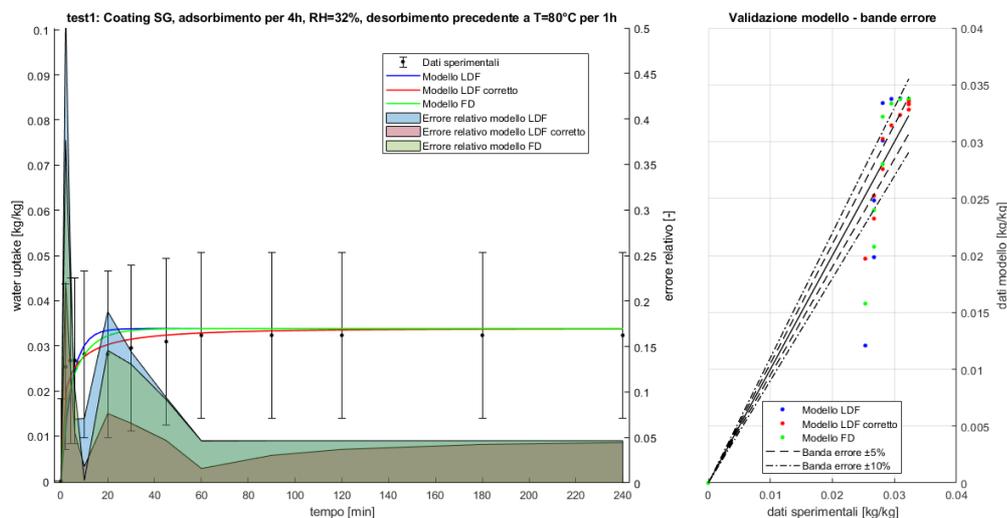


Figura 5.8: Adsorbimento del coating per 4 h a  $21 \text{ °C}$  e RH di equilibrio 32 %

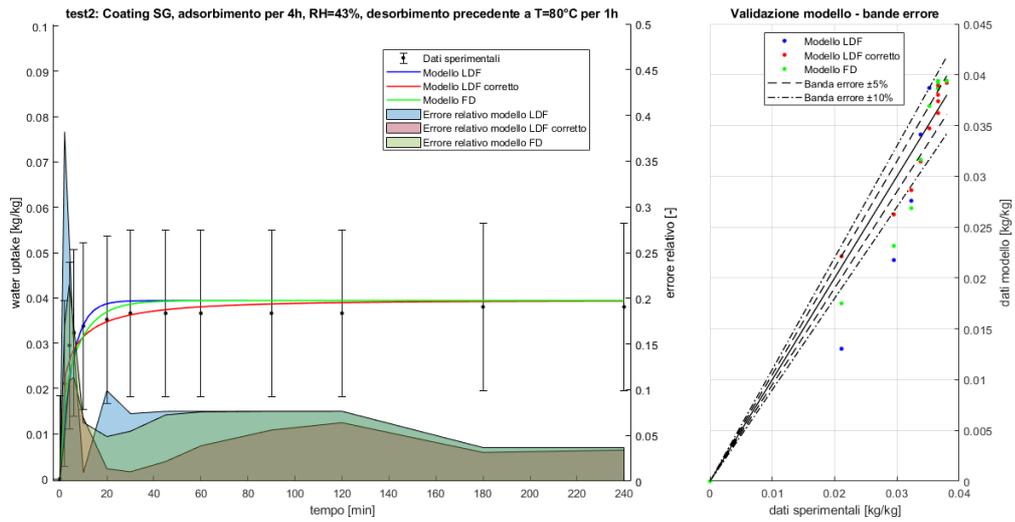


Figura 5.9: Adsorbimento del coating per 4 h a 21 °C e RH di equilibrio 43 %

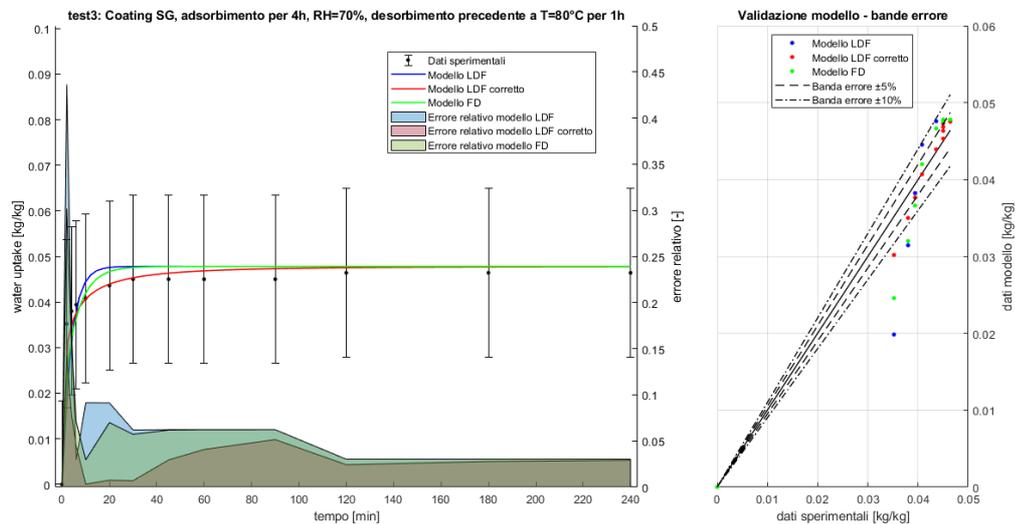


Figura 5.10: Adsorbimento del coating per 4 h a 21 °C e RH di equilibrio 70 %

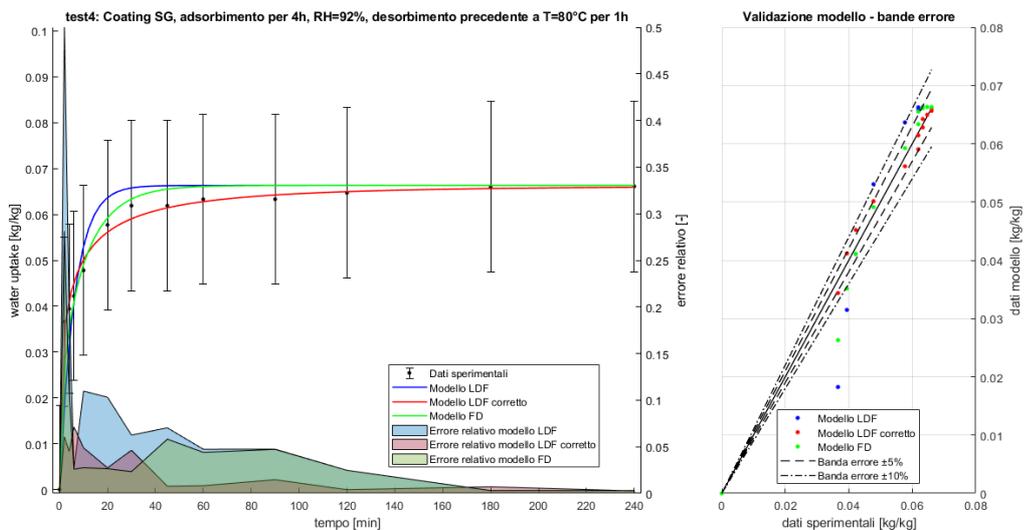


Figura 5.11: Adsorbimento del coating per 4 h a 21 °C e RH di equilibrio 92 %

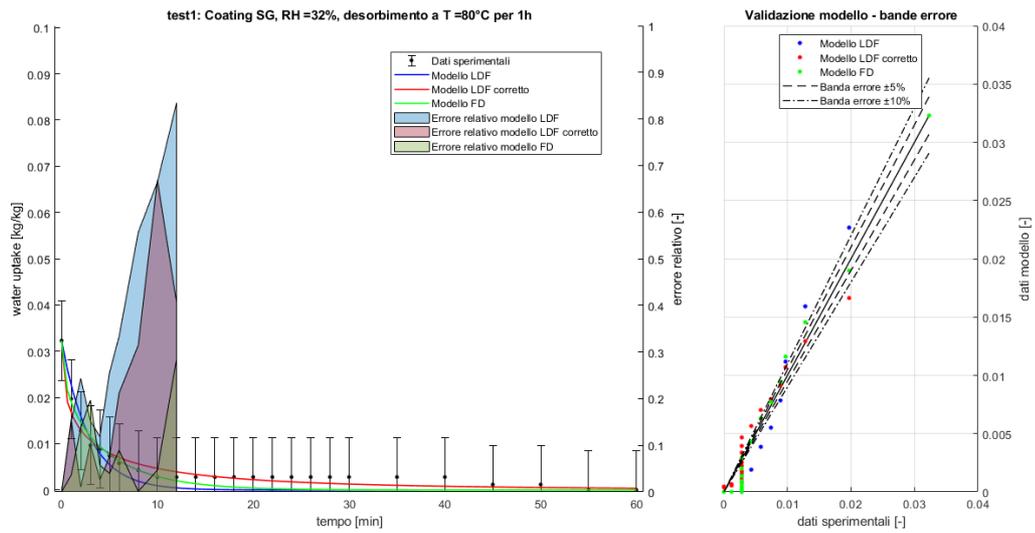


Figura 5.12: Desorbimento del coating per 1 h a 80 °C e water uptake iniziale raggiunto in equilibrio a RH 32 %

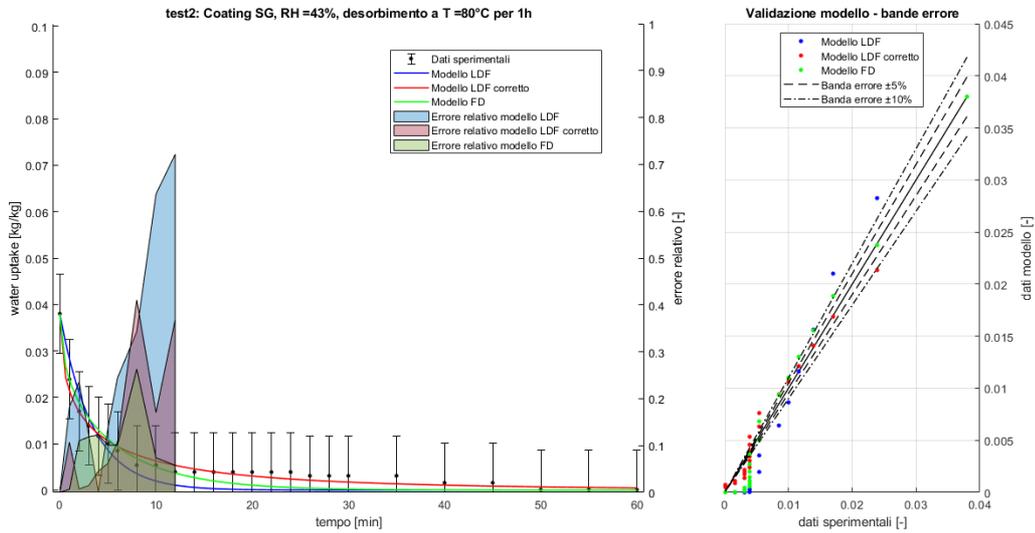


Figura 5.13: Desorbimento del coating per 1 h a 80 °C e water uptake iniziale raggiunto in equilibrio a RH 43 %

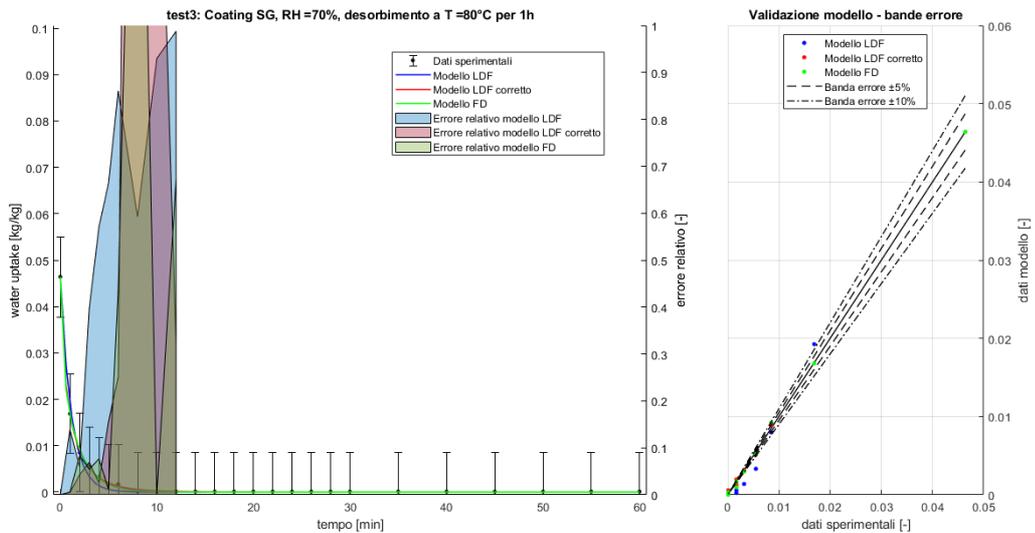


Figura 5.14: Desorbimento del coating per 1 h a 80 °C e water uptake iniziale raggiunto in equilibrio a RH 70 %

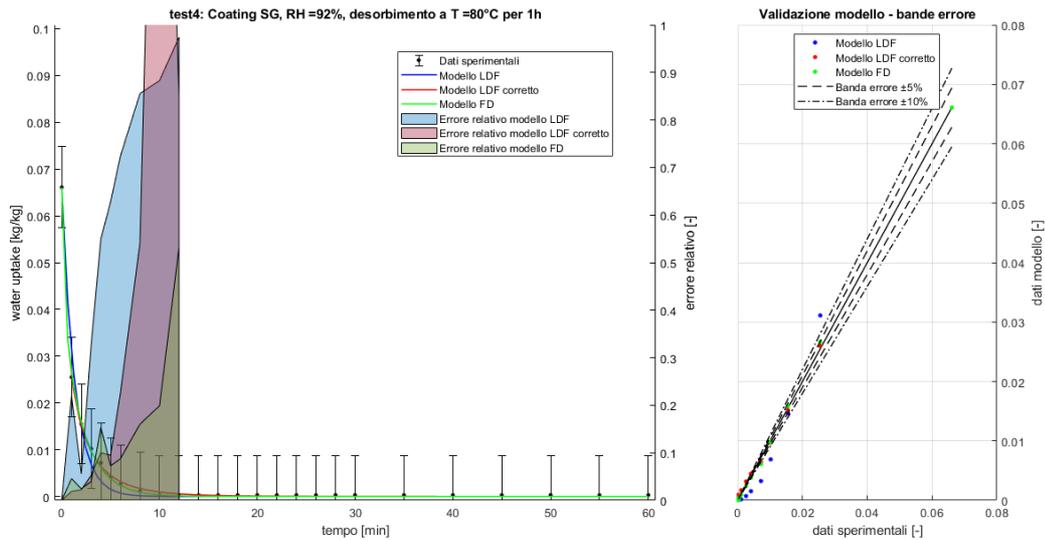


Figura 5.15: Desorbimento del coating per 1 h a 80 °C e water uptake iniziale raggiunto in equilibrio a RH 92 %

Per completezza si riportano ancora le curve di desorbimento e adsorbimento dei casi analizzati, in cui vengono mostrati sia i dati sperimentali sia l'approssimazione ottenuta con il modello scelto (LDF corretto). È raffigurata anche la curva di come varia l'umidità relativa nell'ambiente a umidità controllata durante la fase di carica del materiale.

Anche in questi grafici le curve sono funzione della massa secca valutata a 80 °C.

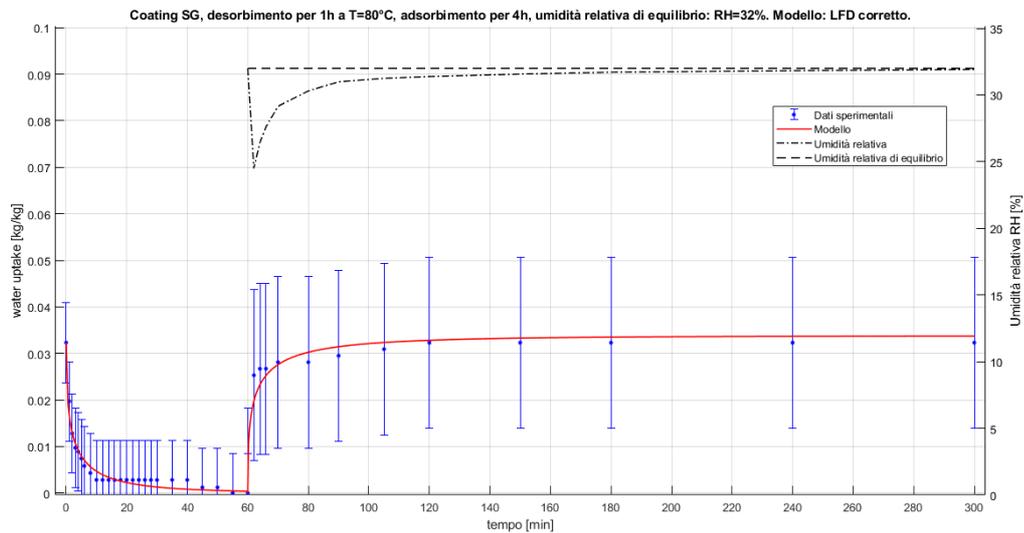


Figura 5.16: Desorbimento 1 h a 80 °C e adsorbimento 4 h a 21 °C, dati sperimentali e modello - Curva umidità relativa in adsorbimento con  $RH^* = 32\%$

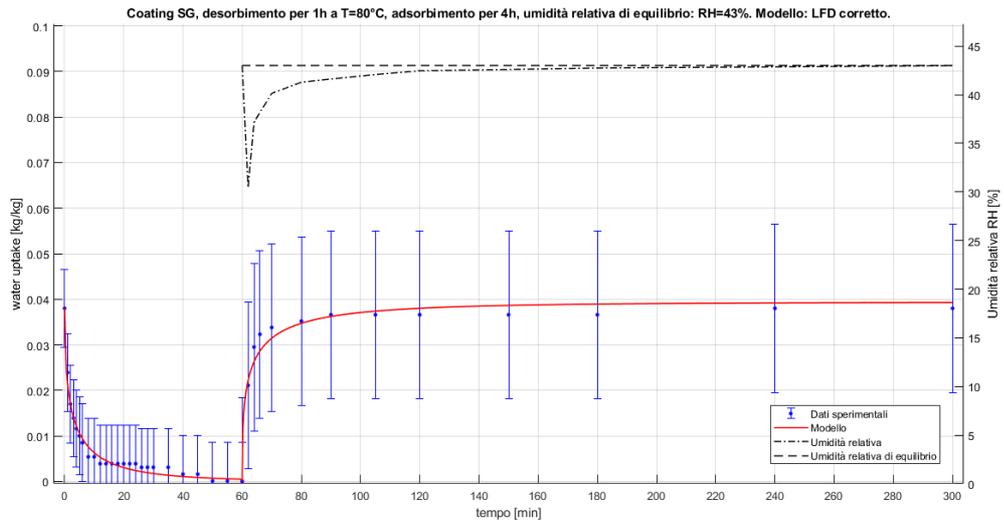


Figura 5.17: Desorbimento 1 h a 80 °C e adsorbimento 4 h a 21 °C, dati sperimentali e modello - Curva umidità relativa in adsorbimento con  $RH^* = 43 \%$

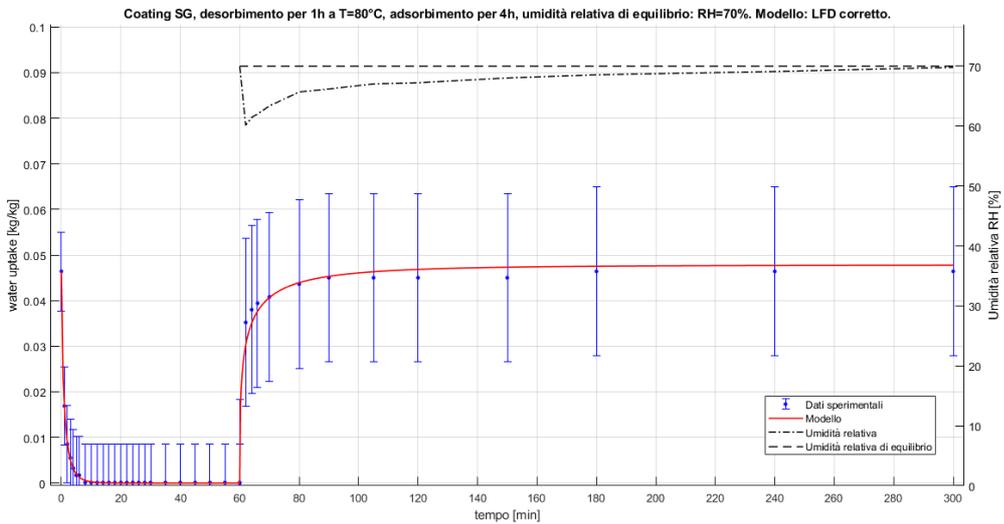


Figura 5.18: Desorbimento 1 h a 80 °C e adsorbimento 4 h a 21 °C, dati sperimentali e modello - Curva umidità relativa in adsorbimento con  $RH^* = 70 \%$

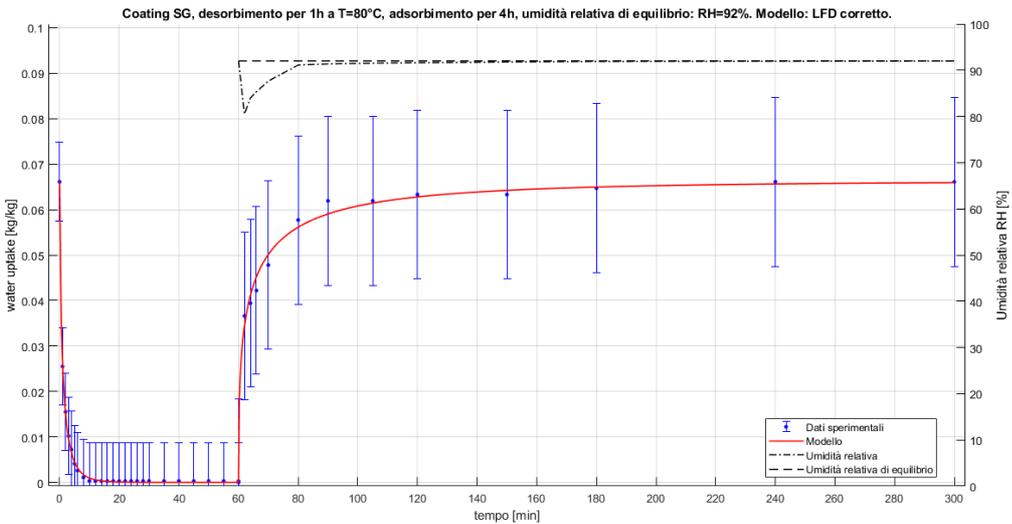


Figura 5.19: Desorbimento 1 h a 80 °C e adsorbimento 4 h a 21 °C, dati sperimentali e modello - Curva umidità relativa in adsorbimento con  $RH^* = 92 \%$

5.3.1 SIMULAZIONE CURVE DEL WATER UPTAKE DEL COATING

All'interno del codice MATLAB precedentemente citato nel paragrafo §4.3 *Simulazione curve di adsorbimento*, è stata inserita una sezione per simulare il comportamento di un coating come quello analizzato sperimentalmente. Il metodo seguito è lo stesso precedentemente spiegato, così come le condizioni di bordo e i vincoli della simulazione.

Una differenza è data dai valori del parametro  $m$ , che in questo frangente valgono:

$m$ [-]	adsorbimento	desorbimento
Coating SG	0,4081	0,5801

Tabella 5.4: Valori coefficiente  $m$  per coating SG

Analogamente è variata la curva che modella il parametro  $D_s$  in funzione della temperatura; anche in questo caso tale funzione si ricava dai valori restituiti dall'analisi sperimentale e modellizzati in funzione degli stessi parametri con il metodo dei minimi quadrati. I nuovi valori che minimizzano l'errore sono dunque:

	$D_{s0}$ [ $m^2/s$ ]	$n$ [-]
Coating SG	$7,238 \cdot 10^{-8}$	1,069

Tabella 5.5: Parametri modello di Arrhenius per il coating

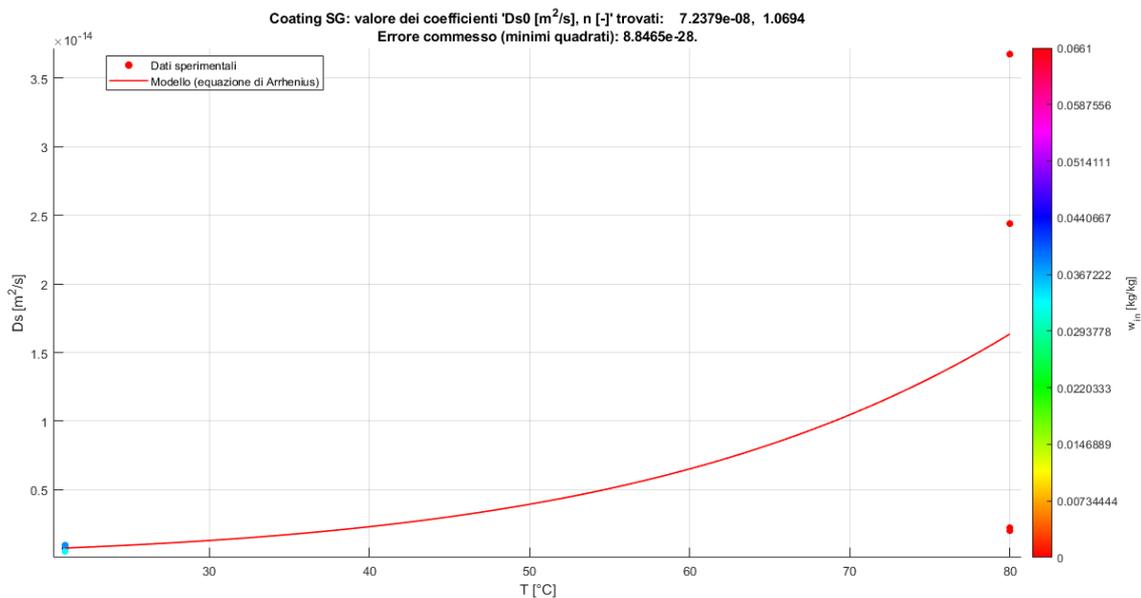


Figura 5.20: Modello  $D_s$  per coating SG

Si può eseguire, infine, una simulazione di una curva di desorbimento e adsorbimento del coating, grazie alla modellazione numerica ottenuta.

Di seguito, viene riportato un esempio simulato a partire dai seguenti dati di input:

- tipologia di materiale: coating di silica gel in polvere;
- temperatura dell'ambiente nella situazione di partenza: 20 °C;
- umidità relativa dell'ambiente nella situazione di partenza: 50 %;
- water uptake nella situazione iniziale del campione: 0,05 kg/kg;
- temperatura di desorbimento: 60 °C;
- durata della fase di desorbimento: 45 min;
- temperatura dell'ambiente di adsorbimento: 25 °C;
- umidità relativa dell'ambiente di adsorbimento: 85 %;
- durata della fase di adsorbimento: 90 min.

La massa secca è calcolata ad 80 °C.

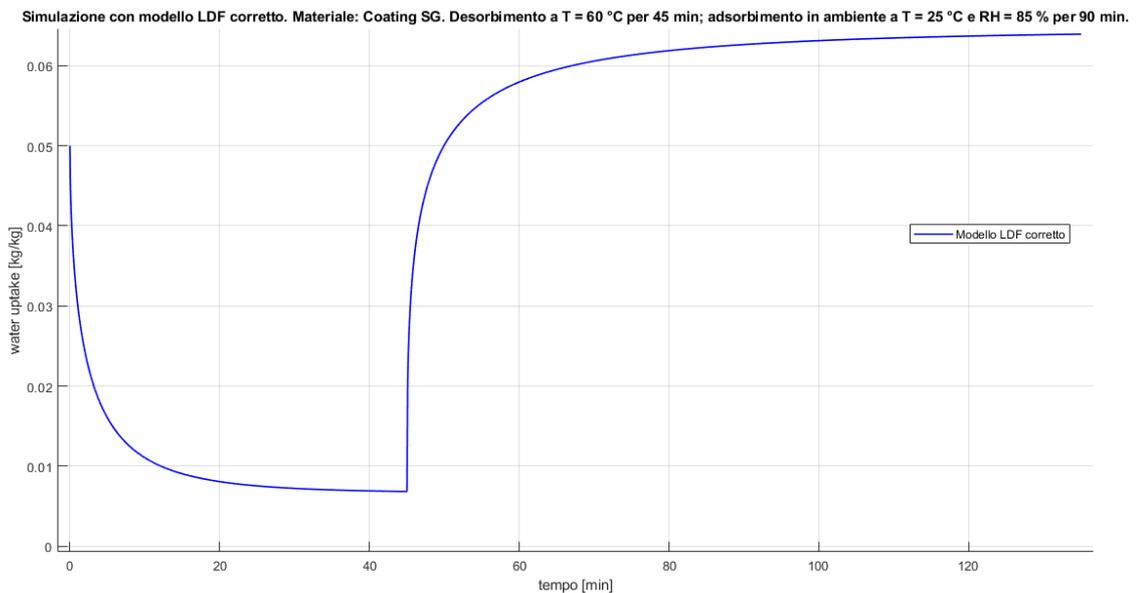


Figura 5.21: Esempio simulazione curva desorbimento e adsorbimento per coating di silica gel

## 6 CONCLUSIONE

Lo scopo di questa tesi, nata all'interno del progetto europeo RE-COGNITION, è quello di investigare la fattibilità di un coating di silica gel in polvere e le variazioni delle sue prestazioni rispetto al materiale puro. In primo luogo, dunque, è stata eseguita una caratterizzazione del materiale adsorbente ed è stata formulata una modellazione numerica grazie al modello LDF opportunamente corretto. In seguito, è stato realizzato il coating di silica gel su lamine di alluminio, disperdendo il materiale adsorbente in una matrice di polidimetilsilossano (PDMS) e dosando opportunamente i componenti. Infine, è stata testata la capacità adsorbente del coating ottenuto, verificato che il modello LDF corretto continuasse a fornire una buona approssimazione nella simulazione del comportamento del coating e confrontato i risultati ottenuti con quelli del materiale puro.

I risultati dei campioni ottenuti hanno mostrato che è possibile far aderire un materiale composito adsorbente su una superficie metallica grazie a un processo semplice da realizzare: dosando i due componenti del PDMS al 30 % circa, il silica gel al 67 % circa e il catalizzatore al 3 % circa, è stato raggiunto il risultato cercato grazie a un agitatore magnetico. Il coating è stato realizzato su piastrine di alluminio per simulare un'alettatura metallica e queste sono state utilizzate per indagare la variazione rispetto al materiale puro in termini di water uptake. L'adesione superficiale del materiale, dunque, funziona e la capacità adsorbente del coating è circa il 30 % rispetto al silica gel in polvere.

Sono state formulate alcune ipotesi per spiegare il significativo decremento della capacità di adsorbimento: è possibile che la matrice di PDMS, che ospita il silica gel, ostruisca la porosità del materiale e disattivi una parte dei pori; una seconda possibilità riguarda l'errata ipotesi di omogeneità delle concentrazioni nel coating, ovvero che il gel di silice non si disperda uniformemente nel composto durante la fase di preparazione e che lo scarto del processo (che rimane sul fondo) contenga più silica gel rispetto al coating realizzato; oppure è ancora possibile che l'adsorbimento non avvenga su tutto lo spessore del coating ma solo

su layer superficiali, ovvero che sia bloccata la diffusione interparticellare all'interno del coating. Nel caso in cui fosse vera quest'ultima ipotesi, non parteciperebbero all'adsorbimento riscontrato nei test sperimentali tutti i 350  $\mu\text{m}$  medi di spessore ma solamente 135  $\mu\text{m}$  (cioè il 40 % circa) con un water uptake della parte attiva di questa porzione del materiale pari a quello del silica gel in polvere puro.

Uno sviluppo futuro per questa tesi dovrebbe escludere alcune possibilità precedentemente elencate: eseguendo un coating senza scarto, ovvero realizzando un campione in cui viene posizionato tutto il materiale che si ottiene, si può verificare se l'omogeneità della concentrazione sia un'ipotesi corretta; realizzando invece campioni con spessori di coating maggiori o minori si può verificare il comportamento del fenomeno della diffusione interparticellare dei layer inferiori. Se infatti è vero che partecipano all'adsorbimento solo i 135  $\mu\text{m}$  degli strati superiori, realizzando campioni con spessore diverso ma sempre maggiore di tale valore, l'adsorbimento deve rimanere costante.

Eseguite tali verifiche, inoltre, potrebbe essere interessante scoprire se il comportamento del coating subisca una variazione applicando il rivestimento a uno scambiatore intero, in cui le masse in gioco sarebbero significativamente maggiori.

Infine, un più ampio sviluppo di questa tesi potrebbe riguardare l'integrazione del coating adsorbente con tecnologie ad energia rinnovabile al fine di realizzare un sistema di climatizzazione ambientale ad adsorbimento.

## BIBLIOGRAFIA

- [1] A. Kalanki, C. Winslow, and I. Campbell, "Global Cooling Prize: Solving the Cooling Dilemma," *RMI*, vol. April, 2021.
- [2] "2020 global status report for buildings and construction: Towards a zero-emissions, efficient and resilient buildings and construction sector," *United Nations Environ. Program.*, pp. 1–7, 2020.
- [3] International Energy Agency (IEA), "The Future of Cooling Opportunities for energy-efficient air conditioning," p. 92, 2018, [Online]. Available: [https://iea.blob.core.windows.net/assets/0bb45525-277f-4c9c-8d0c-9c0cb5e7d525/The\\_Future\\_of\\_Cooling.pdf](https://iea.blob.core.windows.net/assets/0bb45525-277f-4c9c-8d0c-9c0cb5e7d525/The_Future_of_Cooling.pdf).
- [4] Horizon 2020, "RE-COGNITION, System Architecture," no. 815301, 2019.
- [5] Horizon 2020, "RE-COGNITION - Renewable Energy Technologies for Zero Energy Buildings," 2019. <https://re-cognition-project.eu/>.
- [6] P. Vivekh, M. Kumja, D. T. Bui, and K. J. Chua, "Recent developments in solid desiccant coated heat exchangers – A review," *Appl. Energy*, vol. 229, no. August, pp. 778–803, 2018, doi: 10.1016/j.apenergy.2018.08.041.
- [7] H. T. Chua, K. C. Ng, A. Malek, T. Kashiwagi, A. Akisawa, and B. B. Saha, "Modeling the performance of two-bed, silica gel-water adsorption chillers," *Int. J. Refrig.*, vol. 22, no. 3, pp. 194–204, 1999, doi: 10.1016/S0140-7007(98)00063-2.
- [8] R. Narayanan, *Heat-driven cooling technologies*. Elsevier Inc., 2017.
- [9] R. Kent, *Energy Management in Plastics Processing*. 2018.
- [10] D. M. Ruthven, *Principles of Adsorption and Adsorption Processes*. Wiley-Interscience, 1984.
- [11] J. N. Israelachvili, *Intermolecular and Surface Forces*, Third edit. Elsevier Inc., 2011.

- [12] Y. Zhu *et al.*, "A benzyltetramethylimidazolium-based membrane with exceptional alkaline stability in fuel cells: Role of its structure in alkaline stability," *J. Mater. Chem. A*, vol. 6, no. 2, pp. 527–534, 2018, doi: 10.1039/c7ta09095a.
- [13] C. Y. Tso and C. Y. H. Chao, "Activated carbon , silica-gel and calcium chloride composite adsorbents for energy efficient solar adsorption cooling and dehumidification systems Adsorbants composites au gel de silice / chlorure de calcium ` mes de refroidissement et de de ´ shumidifica," *Int. J. Refrig.*, vol. 35, no. 6, pp. 1626–1638, 2012, doi: 10.1016/j.ijrefrig.2012.05.007.
- [14] X. Zheng, T. S. Ge, and R. Z. Wang, "Recent progress on desiccant materials for solid desiccant cooling systems," *Energy*, vol. 74, no. 1, pp. 280–294, 2014, doi: 10.1016/j.energy.2014.07.027.
- [15] M. Thommes *et al.*, "Physisorption of gases, with special reference to the evaluation of surface area and pore size distribution (IUPAC Technical Report)," *Pure Appl. Chem.*, vol. 87, no. 9–10, pp. 1051–1069, 2015, doi: 10.1515/pac-2014-1117.
- [16] N. Ayawei, A. N. Ebelegi, and D. Wankasi, "Modelling and Interpretation of Adsorption Isotherms," *J. Chem.*, vol. 2017, p. 11, 2017, doi: 10.1155/2017/3039817.
- [17] S. Brunauer, P. H. Emmett, and E. Teller, "Adsorption of Gases in Multimolecular Layers," *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 60, no. 2, pp. 309–319, 1938, doi: <https://doi.org/10.1021/ja01269a023>.
- [18] A. Sakoda and M. Suzuki, "Fundamental study on solar powered adsorption cooling system," *J. Chem. Eng. Jpn.*, vol. 17, no. 1, pp. 52–57, 1984.
- [19] Y. I. Aristov, M. M. Tokarev, A. Freni, I. S. Glaznev, and G. Restuccia, "Kinetics of water adsorption on silica Fuji Davison RD," *Microporous Mesoporous Mater.*, vol. 1387, no. 96, pp. 65–71, 2006, doi: 10.1016/j.micromeso.2006.06.008.
- [20] G. Xu, W. Guan, S. Shi, and D. Blesch, "Adsorption model development for mass transport characteristics of MFEP structure by physisorption method," *Chem. Eng. J.*, vol. 354, no. August, pp. 922–931, 2018, doi: 10.1016/j.cej.2018.08.080.

- [21] K. Ahmed, A. Pal, T. Hasan, M. L. Palash, and B. Baran, "Recent advances of composite adsorbents for heat transformation applications," *Therm. Sci. Eng. Prog.*, vol. 23, no. February, p. 100900, 2021, doi: 10.1016/j.tsep.2021.100900.
- [22] H. Wu, F. Salles, and J. Zajac, "A critical review of solid materials for low-temperature thermochemical storage of solar energy based on solid-vapour adsorption in view of space heating uses," *Molecules*, vol. 24, no. 5, 2019, doi: 10.3390/molecules24050945.
- [23] X. Zheng, T. S. Ge, R. Z. Wang, and L. M. Hu, "Performance study of composite silica gels with different pore sizes and different impregnating hygroscopic salts," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 120, pp. 1–9, 2014, doi: 10.1016/j.ces.2014.08.047.
- [24] X. Zheng, L. W. Wang, R. Z. Wang, T. S. Ge, and T. F. Ishugah, "Thermal conductivity, pore structure and adsorption performance of compact composite silica gel," *Int. J. Heat Mass Transf.*, vol. 68, pp. 435–443, 2014, doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2013.09.075.
- [25] M. M. Younes *et al.*, "Synthesis and characterization of silica gel composite with polymer binders for adsorption cooling applications," *Int. J. Refrig.*, vol. 98, pp. 161–170, 2019, doi: 10.1016/j.ijrefrig.2018.09.003.
- [26] X. J. Zhang and L. M. Qiu, "Moisture transport and adsorption on silica gel-calcium chloride composite adsorbents," *Energy Convers. Manag.*, vol. 48, no. 1, pp. 320–326, 2007, doi: 10.1016/j.enconman.2006.04.001.
- [27] C. H. Chen, C. Y. Hsu, C. C. Chen, and S. L. Chen, "Silica gel polymer composite desiccants for air conditioning systems," *Energy Build.*, vol. 101, pp. 122–132, 2015, doi: 10.1016/j.enbuild.2015.05.009.
- [28] N. Yu, R. Z. Wang, Z. S. Lu, and L. W. Wang, "Development and characterization of silica gel-LiCl composite sorbents for thermal energy storage," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 111, pp. 73–84, 2014, doi: 10.1016/j.ces.2014.02.012.
- [29] Y. Fang, X. Bi, X. Liang, W. Yao, X. Gao, and Z. Zhang, "Preparation and

- characterization of hygroscopic CMC graft copolymer/silica gel composite adsorbent,” *J. Chem. Eng. Japan*, vol. 49, no. 7, pp. 622–629, 2016, doi: 10.1252/jcej.15we253.
- [30] L. Pino, Y. Aristov, G. Cacciola, and G. Restuccia, “Composite materials based on zeolite 4A for adsorption heat pumps,” *Adsorption*, vol. 3, no. 1, pp. 33–40, 1997, doi: 10.1007/BF01133005.
- [31] M. J. Goldsworthy, “Measurements of water vapour sorption isotherms for RD silica gel , AQSOA-Z01 , AQSOA-Z02 , AQSOA-Z05 and CECA zeolite 3A,” *Microporous Mesoporous Mater.*, vol. 196, pp. 59–67, 2014, doi: 10.1016/j.micromeso.2014.04.046.
- [32] Z. Lin, X. Zheng, and K. Chen, “Synthesis and Characterization of Alginate–Silica Gel Composites for Adsorption Dehumidification,” *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 59, no. 13, pp. 5760–5767, 2020, doi: 10.1021/acs.iecr.9b06157.
- [33] H. Mittal, A. Al Alili, and S. M. Alhassan, “Solid polymer desiccants based on poly(acrylic acid-co-acrylamide) and Laponite RD: Adsorption isotherm and kinetics studies,” *Colloids Surfaces A Physicochem. Eng. Asp.*, vol. 599, no. March, p. 124813, 2020, doi: 10.1016/j.colsurfa.2020.124813.
- [34] H. Mittal, A. L. I. Al-alili, and S. M. Alhassan, “Adsorption isotherm and kinetics of water vapor adsorption using novel super-porous hydrogel composites,” *ASME*, pp. 1–10, 2020.
- [35] Q. Ma and X. Zheng, “Preparation and characterization of thermo-responsive composite for adsorption-based dehumidification and water harvesting,” *Chem. Eng. J.*, vol. 429, no. July 2021, p. 132498, 2022, doi: 10.1016/j.cej.2021.132498.
- [36] F. Xin, Z. X. Yuan, W. C. Wang, and C. X. Du, “Experimental comparison of adsorption characteristics of silica gel and zeolite in moist air,” *Heat Mass Transf. und Stoffuebertragung*, vol. 53, no. 2, pp. 387–394, 2017, doi: 10.1007/s00231-016-1829-y.
- [37] L. Liu *et al.*, “Comparative study on the water uptake kinetics and dehumidification

- performance of silica gel and aluminophosphate zeolites coatings,” *Energy*, vol. 242, p. 122957, 2021, doi: 10.1016/j.energy.2021.122957.
- [38] X. Zheng, R. Z. Wang, T. S. Ge, and L. M. Hu, “Performance study of SAPO-34 and FAPO-34 desiccants for desiccant coated heat exchanger systems,” *Energy*, vol. 93, pp. 88–94, 2015, doi: 10.1016/j.energy.2015.09.024.
- [39] A. Rezk, R. Al-Dadah, S. Mahmoud, and A. Elsayed, “Characterisation of metal organic frameworks for adsorption cooling,” *Int. J. Heat Mass Transf.*, vol. 55, no. 25–26, pp. 7366–7374, 2012, doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2012.07.068.
- [40] S. Cui *et al.*, “Metal-Organic Frameworks as advanced moisture sorbents for energy-efficient high temperature cooling,” *Sci. Rep.*, vol. 8, no. 1, pp. 2–10, 2018, doi: 10.1038/s41598-018-33704-4.
- [41] F. Kapteijn, X. Liu, and X. Wang, “Water and Metal–Organic Frameworks- From Interaction toward Utilisation,” *Chem. Rev.*, vol. 120, no. 16, pp. 8303–8377, 2020, doi: 10.1021/acs.chemrev.9b00746.
- [42] M. Qin, P. Hou, Z. Wu, and J. Wang, “Precise humidity control materials for autonomous regulation of indoor moisture,” *Build. Environ.*, vol. 169, no. July 2019, p. 106581, 2020, doi: 10.1016/j.buildenv.2019.106581.
- [43] D. Wang, J. Zhang, Q. Yang, N. Li, and K. Sumathy, “Study of adsorption characteristics in silica gel – water adsorption refrigeration,” *Appl. Energy*, vol. 113, pp. 734–741, 2014, doi: 10.1016/j.apenergy.2013.08.011.
- [44] D. Wang, J. Zhang, Y. Xia, Y. Han, and S. Wang, “Investigation of adsorption performance deterioration in silica gel – water adsorption refrigeration,” *Energy Convers. Manag.*, vol. 58, pp. 157–162, 2012, doi: 10.1016/j.enconman.2012.01.013.
- [45] T. S. Ge, Y. J. Dai, R. Z. Wang, and Z. Z. Peng, “Experimental comparison and analysis on silica gel and polymer coated fin-tube heat exchangers,” *Energy*, vol. 35, pp. 2893–2900, 2010, doi: 10.1016/j.energy.2010.03.020.

- [46] Y. Jiang, T. S. Ge, R. Z. Wang, and L. M. Hu, "Experimental investigation and analysis of composite silica-gel coated fin-tube heat exchangers," *Int. J. Refrig.*, vol. 51, pp. 169–178, 2015, doi: 10.1016/j.ijrefrig.2014.11.012.
- [47] I. I. El-sharkawy, "On the linear driving force approximation for adsorption cooling applications," *Int. J. Refrig.*, vol. 34, no. 3, pp. 667–673, 2011, doi: 10.1016/j.ijrefrig.2010.12.006.
- [48] R. H. Mohammed, O. Mesalhy, M. L. Elsayed, S. Hou, M. Su, and L. C. Chow, "Physical properties and adsorption kinetics of silica-gel/water for adsorption chillers," *Appl. Therm. Eng.*, vol. 137, no. April, pp. 368–376, 2018, doi: 10.1016/j.applthermaleng.2018.03.088.
- [49] G. M. Munz *et al.*, "First results of a coated heat exchanger for the use in dehumidification and cooling processes," *Appl. Therm. Eng.*, vol. 61, no. 2, pp. 878–883, 2013, doi: 10.1016/j.applthermaleng.2013.08.041.
- [50] L. Calabrese, L. Bonaccorsi, P. Bruzzaniti, A. Frazzica, A. Freni, and E. Proverbio, "Adsorption performance and thermodynamic analysis of SAPO-34 silicone composite foams for adsorption heat pump applications," *Mater. Renew. Sustain. Energy*, vol. 7, no. 4, pp. 1–13, 2018, doi: 10.1007/s40243-018-0131-y.
- [51] A. Karmakar, V. Prabakaran, D. Zhao, and K. J. Chua, "A review of metal-organic frameworks (MOFs) as energy-efficient desiccants for adsorption driven heat-transformation applications," *Appl. Energy*, vol. 269, no. April, p. 115070, 2020, doi: 10.1016/j.apenergy.2020.115070.
- [52] Kern, "KERN DBS 60-3," no. 0. p. 1, [Online]. Available: [https://www.kern-sohn.com/cgi-bin/cosmoshop/lshop.cgi?action=suche&ls=en&gesamt\\_zeilen=0&fresh=1&suchbegriff=DBS 60-3](https://www.kern-sohn.com/cgi-bin/cosmoshop/lshop.cgi?action=suche&ls=en&gesamt_zeilen=0&fresh=1&suchbegriff=DBS 60-3).
- [53] Kern, "KERN KB360-3N KERN KB360-3N," no. 0. pp. 1–2, [Online]. Available: <https://www.kern-sohn.com/cgi->

bin/cosmoshop/lshop.cgi?action=showdetail&ls=en&rubnum=produkte.194.10328&artnum=KB-N%7C-%7C-%7C10328.

- [54] M. M. Younes, I. I. El-Sharkawy, A. E. Kabeel, K. Uddin, T. Miyazaki, and B. B. Saha, "Characterization of silica gel-based composites for adsorption cooling applications," *Int. J. Refrig.*, vol. 118, pp. 345–353, 2020, doi: 10.1016/j.ijrefrig.2020.04.002.
- [55] R. Ariati, F. Sales, A. Souza, R. A. Lima, and J. Ribeiro, "Polydimethylsiloxane composites characterization and its applications: A review," *Polymers (Basel)*, vol. 13, no. 23, pp. 1–21, 2021, doi: 10.3390/polym13234258.
- [56] A. Mata, A. J. Fleischman, and S. Roy, "Characterization of Polydimethylsiloxane (PDMS) Properties for Biomedical Micro/Nanosystems," *Biomed. Microdevices*, vol. 7, no. 4, pp. 281–293, 2005, doi: 10.1007/s10544-005-6070-2.
- [57] Gelest, "POLYDIMETHYLSILOXANE, TRIMETHYLSILOXY TERMINATED - Safety Data Sheet," 2014.
- [58] Gelest, "SILANOL TERMINATED POLYDIMETHYLSILOXANE - Safety data sheet," 2015.
- [59] Gelest, "BIS (NEODECANOATE) TIN, tech-90 - Safety Data Sheet," 2015.

## APPENDICE

### A.1. Datasheet termobilancia Kern DBS 60-3

#### KERN DBS60-3

Moisture analyser with graphics display and 10 memories for drying programs




#### Measuring system

Adjustment options:	External calibration
Linearity:	3 mg
Measuring capacity [Max]:	200 °C
Minimum weight (USP):	2 g
Readability (moisture):	0,010 %
Readability [d]:	1 mg
Repeatability:	1 mg
Resolution:	60000
Stabilisation time under laboratory conditions:	3 s
Tare range:	60 g
Warm up time:	2 h
Weighing capacity [Max]:	60 g
Weighing units:	% Trockenmasse g % Feuchte % ATRO

#### Display

Display digit height (large):	1,500 cm
Display digit height (small):	5 mm

#### Functions

Standby function:	yes
-------------------	-----

#### Environmental conditions

Maximum humidity:	85 %
Maximum operating temperature:	40 °C
Minimum ambient temperature:	5 °C
Minimum humidity:	5 %

#### Power supply

Input voltage:	220 V - 240 V AC 50 Hz
Mains adapter/adapter included:	EURO

#### Services (optional)

Adjustment at the location of installation: 961-247

DAkKS Certificate:	963-127
Factory calibration certificate (temperature):	964-305

#### Category

Brand:	KERN
Product Group:	Moisture analyser

#### Packaging & shipping

Delivery:	24 h
Dimensions packaging (WxDxH):	347 x 470 x 373 mm
Gross weight:	6,830 kg
Net weight:	4,600 kg
Shipping method:	Parcel service

#### Construction

Level indicator:	yes
Material weighing plate:	stainless steel
Overall dimensions mounted (WxDxH):	204 x 336 x 167 mm
Revolving screw feet:	yes
Weighing surface (d):	95

#### Piktogramme

#### STANDARD



#### OPTION



## A.2. Datasheet bilancia Kern KB 360-3N

### KERN KB 360-3N

Kompakte Präzisionswaage mit großem Wägebereich, auch mit Eichzulassung [M]




#### Measuring system

Adjustment options:	External calibration
Linearity:	5 mg
n/a:	4 g
Readout [d]:	1 mg
Recommended adjusting weight:	300 g (E2)
Reproducibility:	2 mg
Resolution:	360000
Stabilisation time:	3 s
Warm up time:	2 h
Weighing range [Max]:	360 g
Weighing system:	Strain gauge
Weighing units:	* ct dwt g gn kg lb oz t tl (Cn) tl (HK) tl (Singap. Malays) tl (Tw) to

#### Display

Display digit height:	9 mm
-----------------------	------

#### Counting

Counting resolution:	360000
Minimum piece weight at piece counting (Laboratory):	1 mg
Minimum piece weight at piece counting (Normal):	10 mg

#### Functions

Conversion function:	yes
Counting function:	yes
Percentage determination:	yes
PRE-TARE function:	yes
Suspended weighing:	Hook
Vibration-free weighing (Animal weighing program):	yes

#### Environmental conditions

Maximum humidity:	80 %
Maximum operating temperature:	40 °C
Minimum ambient temperature:	10 °C

#### Power supply

Charging time:	10 h
Input voltage:	100 V - 240 V
n/a:	CH EURO UK US

n/a:	Mains adapter external
------	------------------------

#### Power supply

Operating time (Backlight off):	30 h
Operating time (Backlight on):	15 h
Rechargeable battery:	Rchrg. battery optional

#### Service

DAkKS Certificate:	963-127
--------------------	---------

#### Category

Brand:	KERN
Category:	Balances
Product Group:	Precision balance

#### Packaging & shipping

Delivery:	24 h
Dimensions packaging (WxDxH):	238 x 357 x 180 mm
Gross weight:	2,200 kg
Net weight:	1 kg
Shipping method:	Parcel service

#### Construction

Casing material:	Plastic
Dimensions draft shield (ÄxH):	106   42
Dimensions housing (WxDxH):	167 x 250 x 85 mm
Level indicator:	yes
Overall dimensions mounted (WxDxH):	167 x 250 x 123 mm

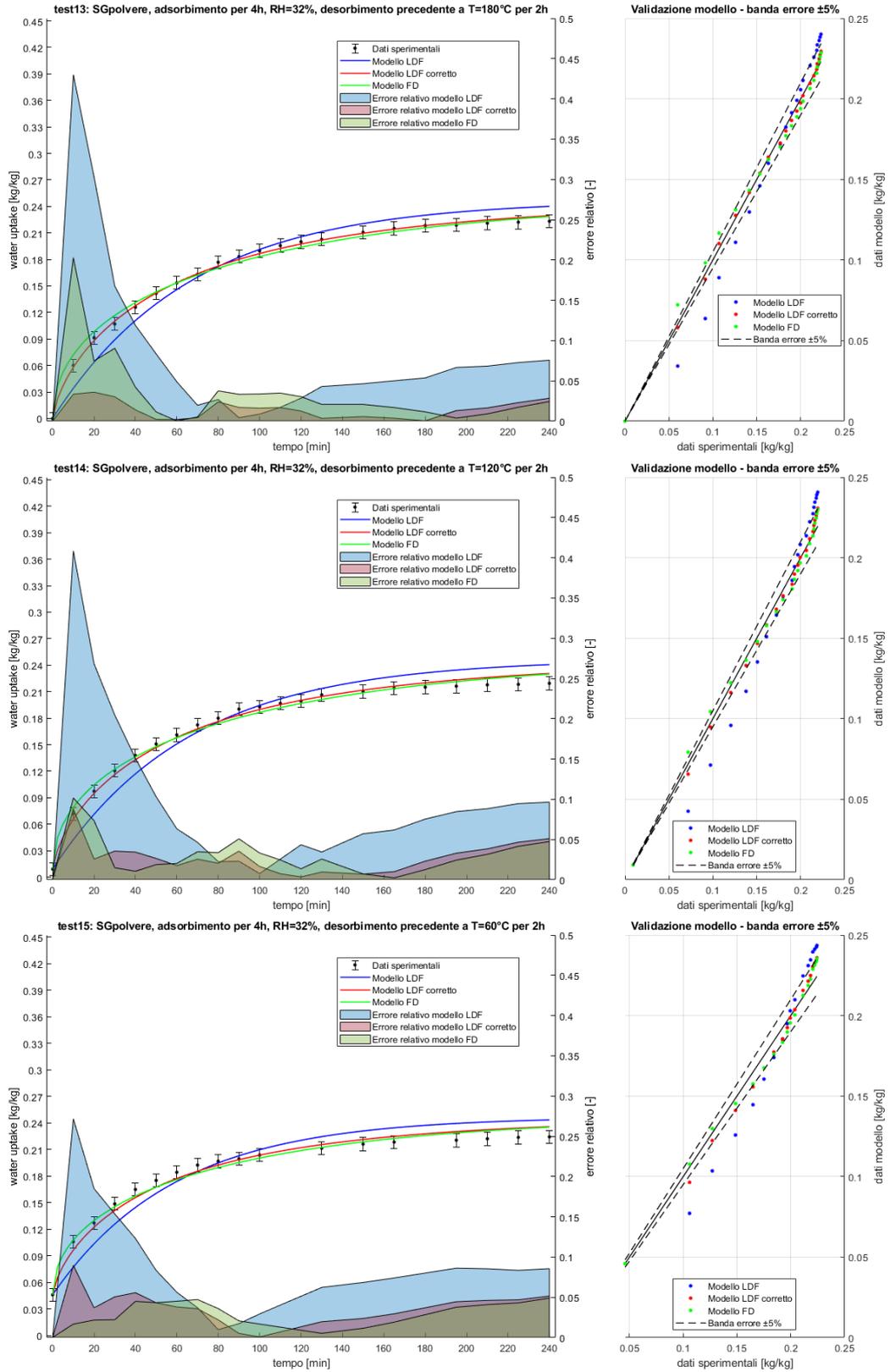
## KERN KB 360-3N

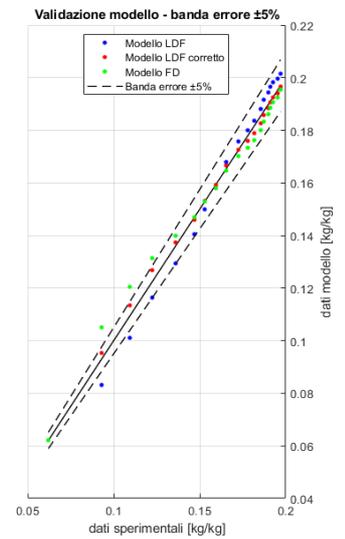
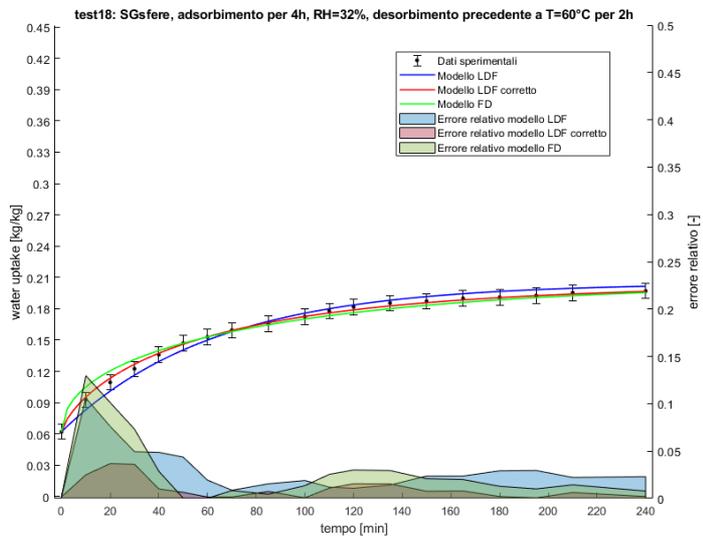
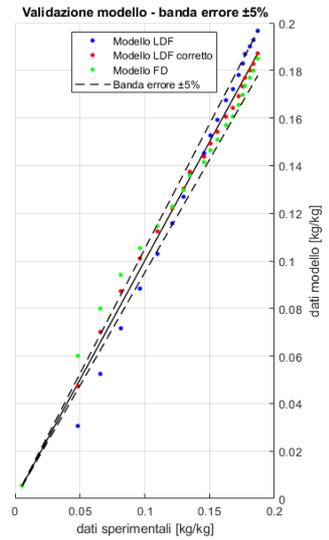
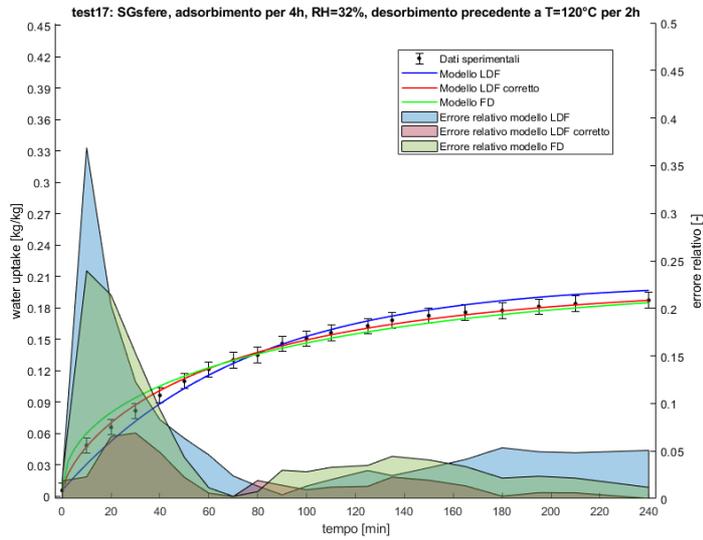
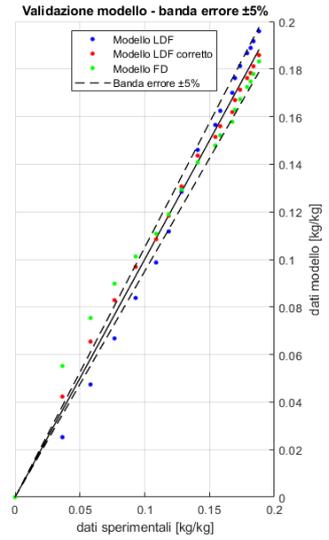
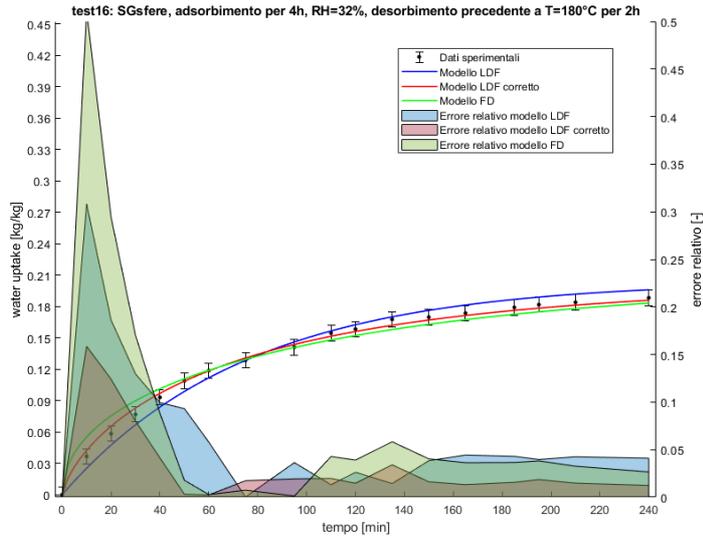
Kompakte Präzisionswaage mit großem Wägebereich, auch mit Eichzulassung [M]

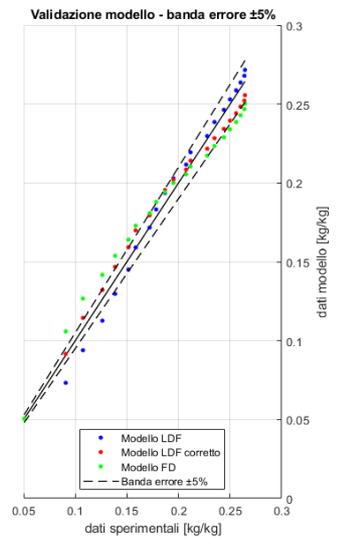
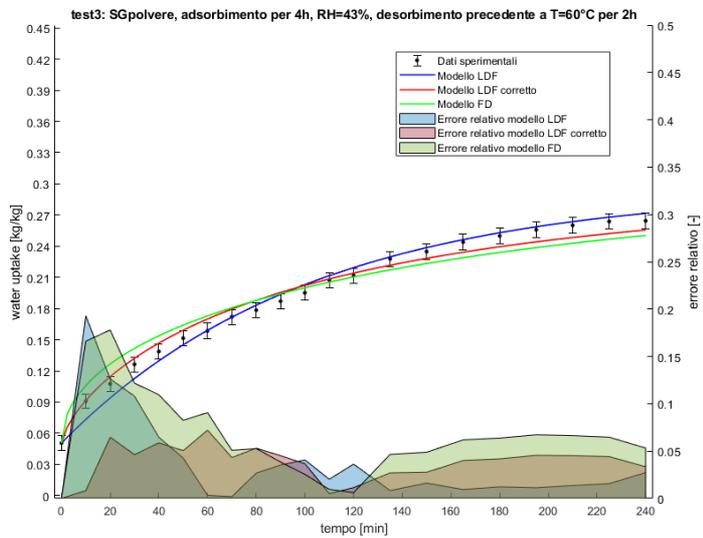
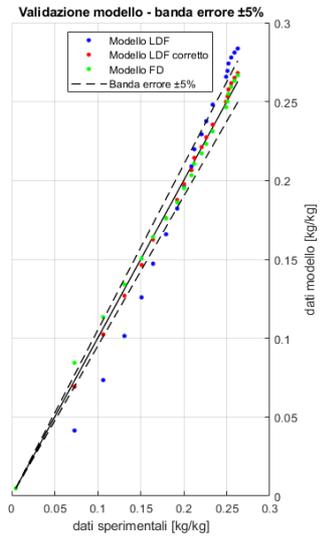
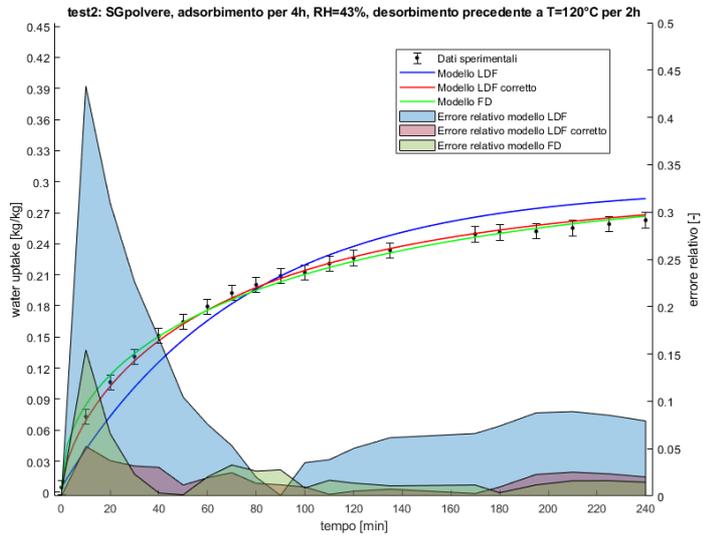
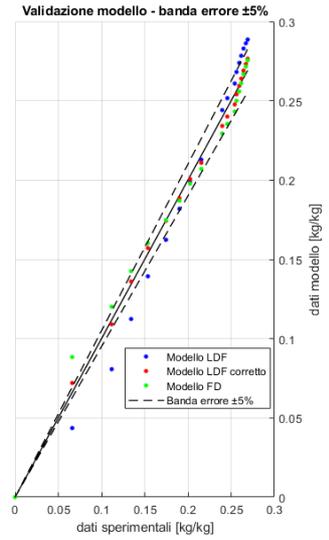
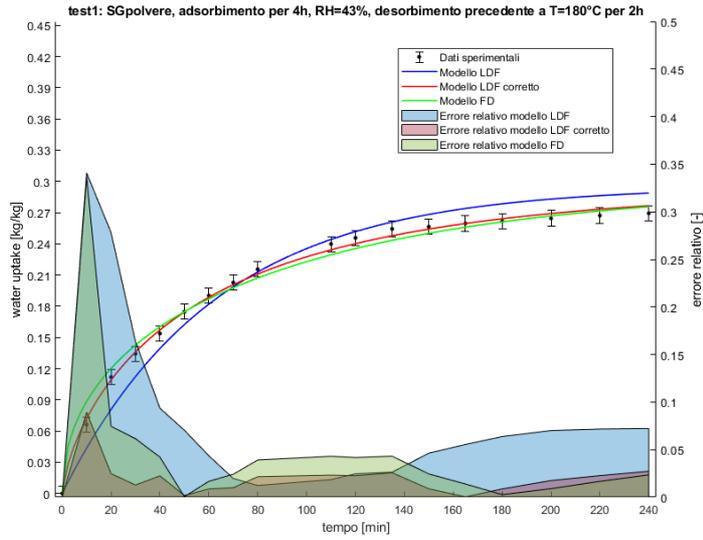


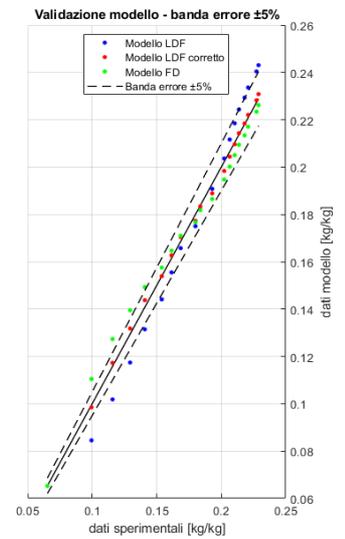
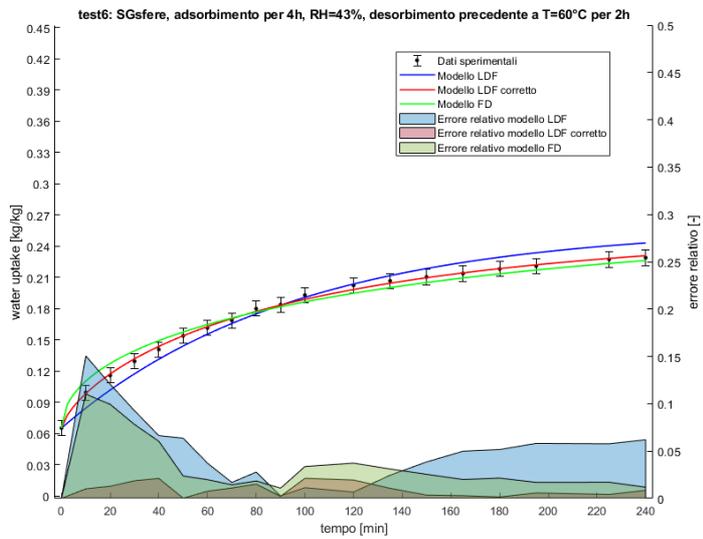
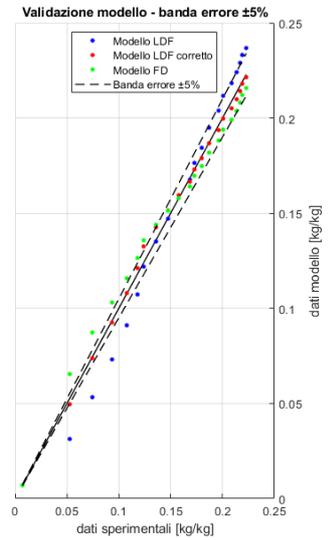
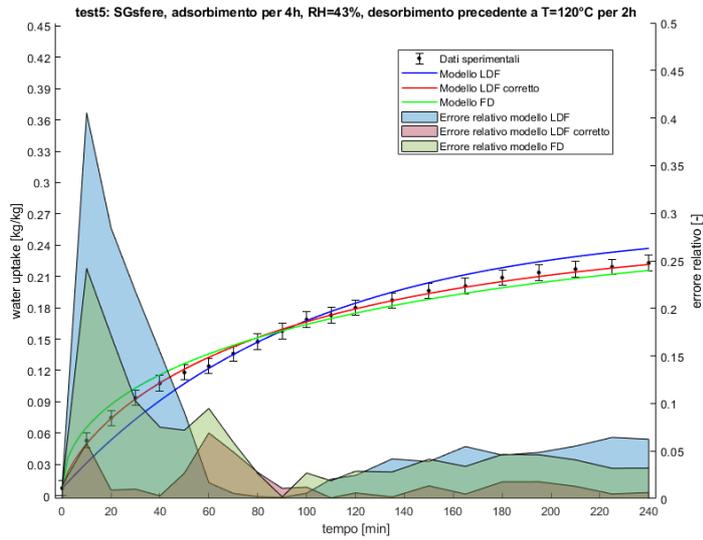
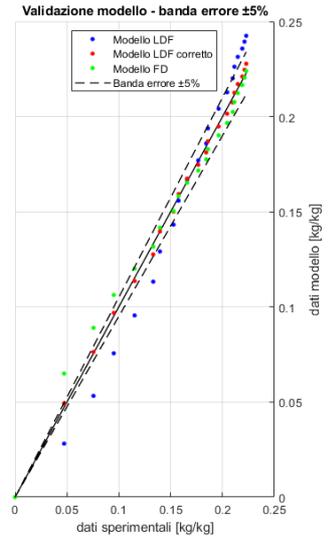
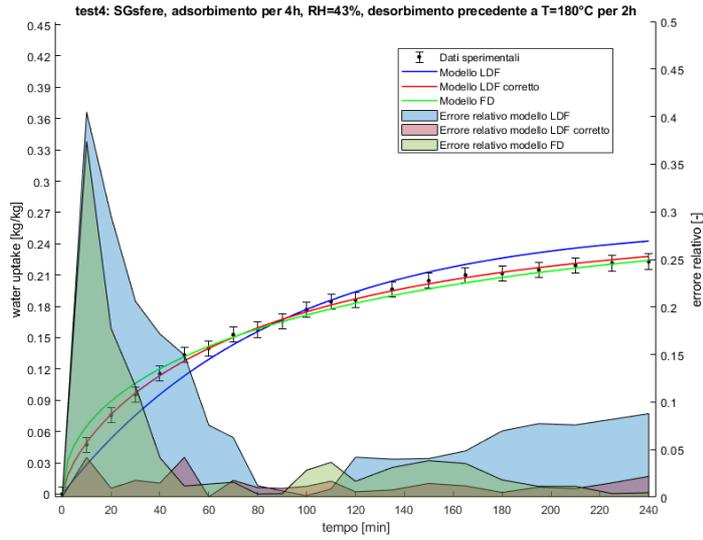
Revolving screw feet:	yes
Weighing space (ÅxH):	90   40
Weighing surface (d):	81

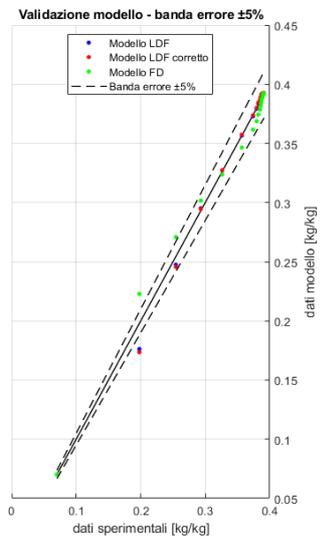
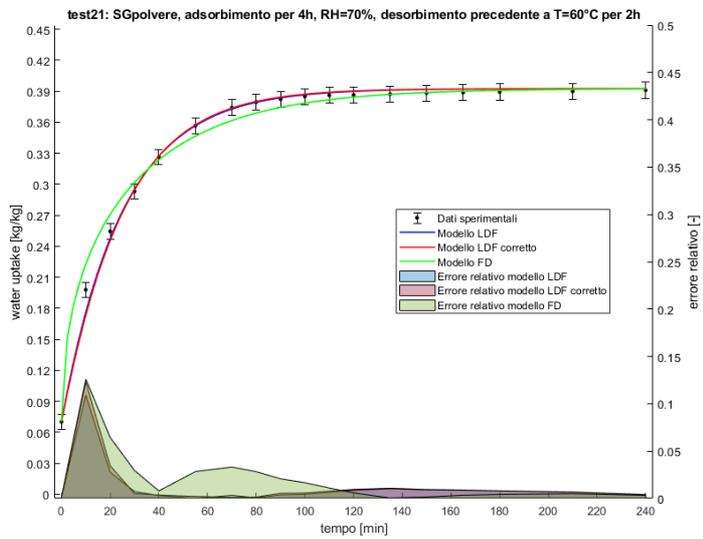
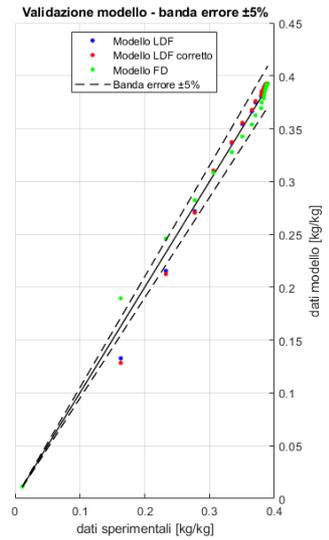
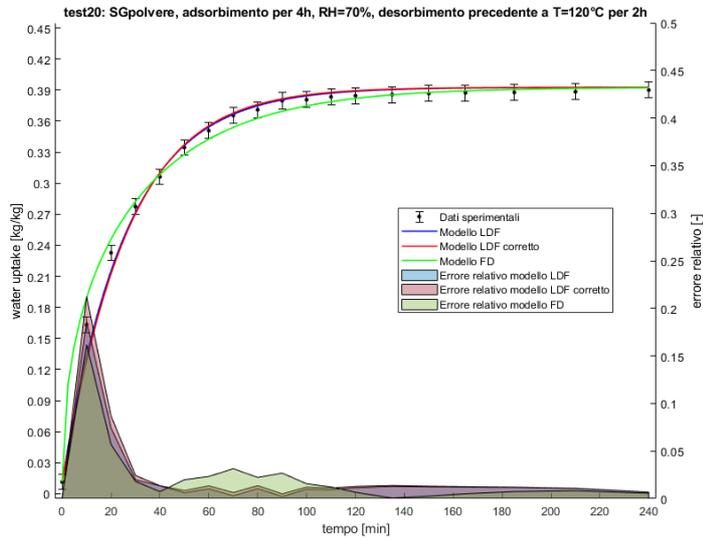
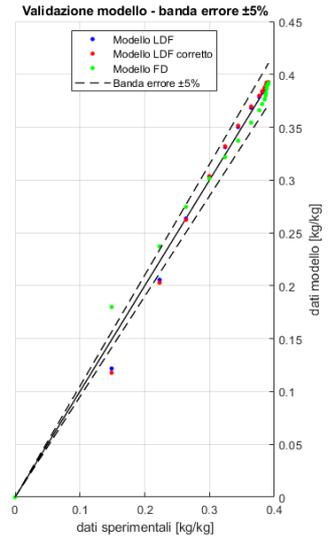
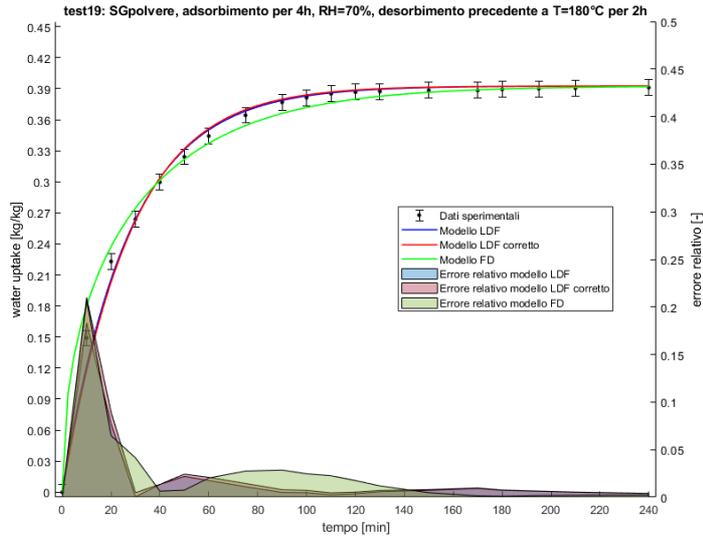
### A.3. Test di adsorbimento dei materiali: dati sperimentali e modellazione

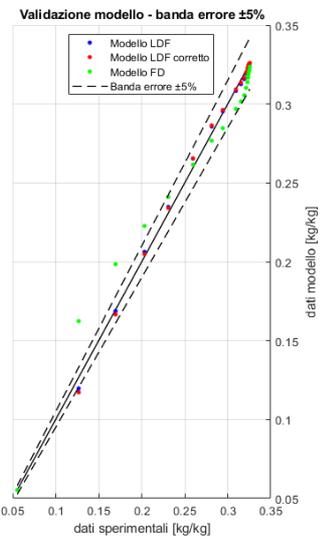
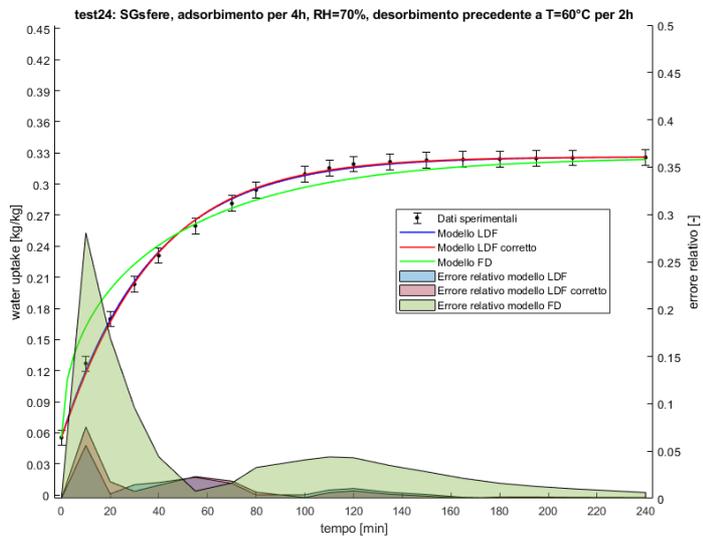
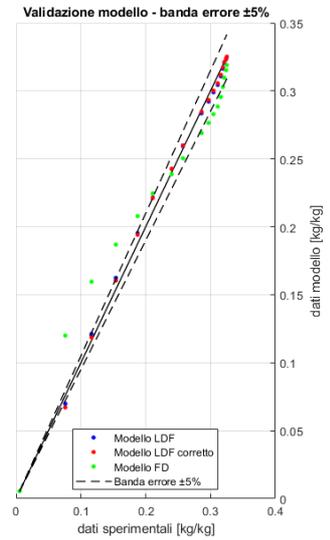
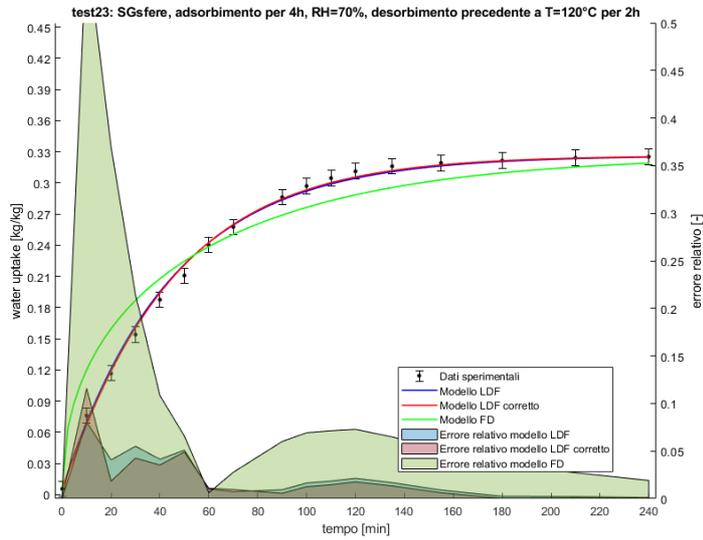
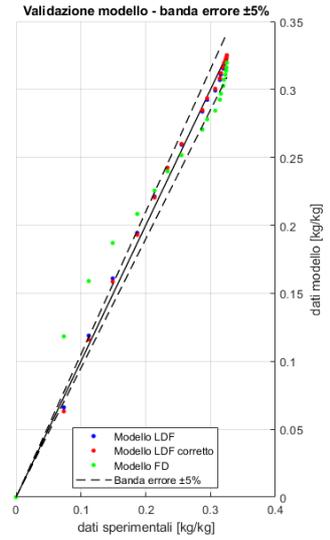
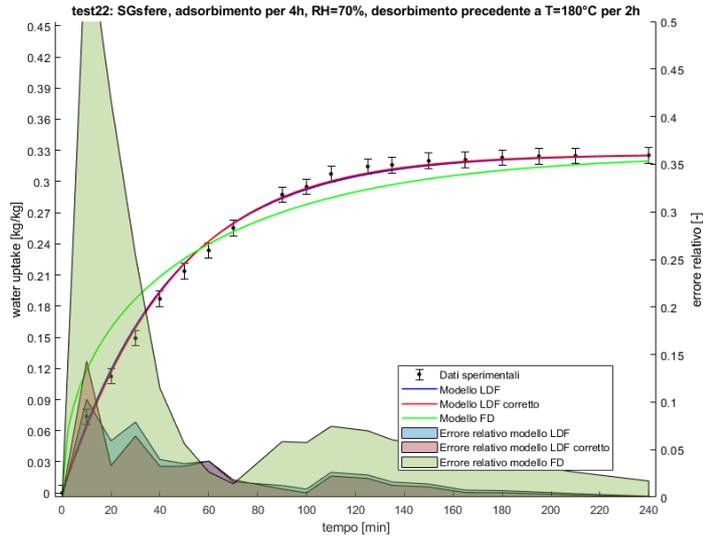


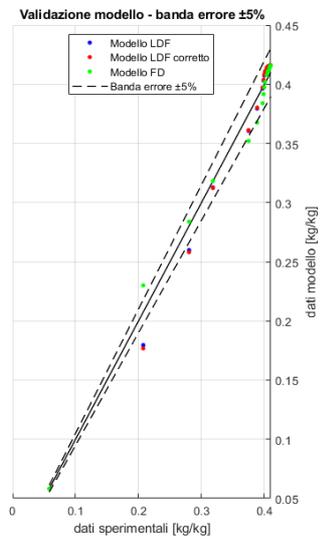
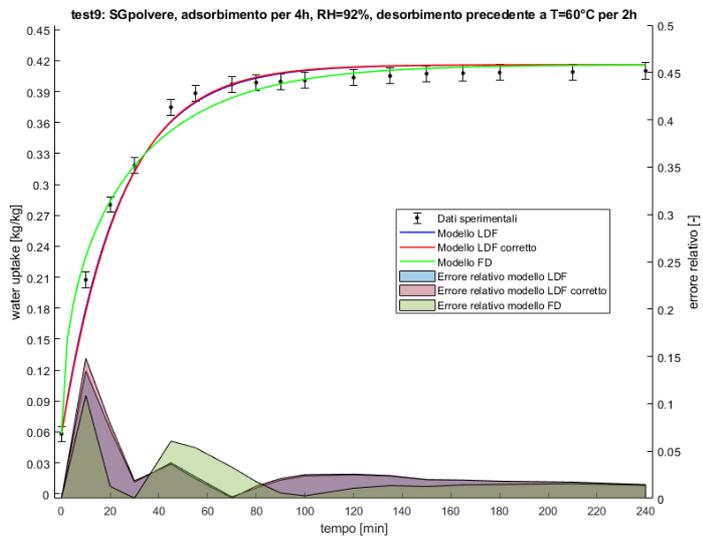
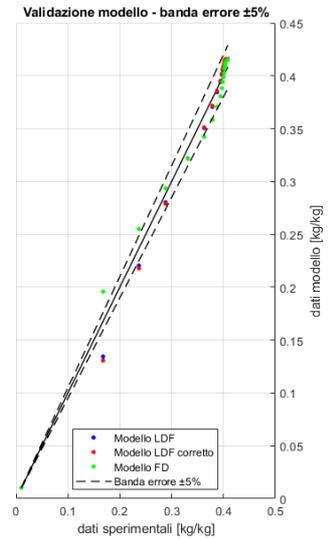
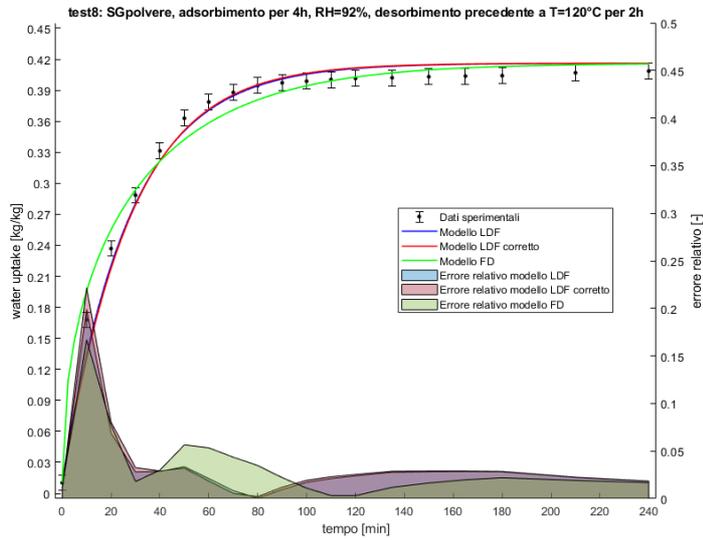
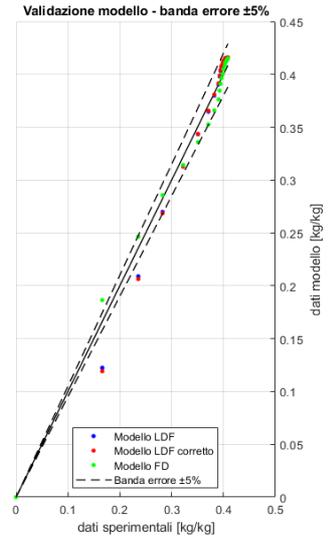
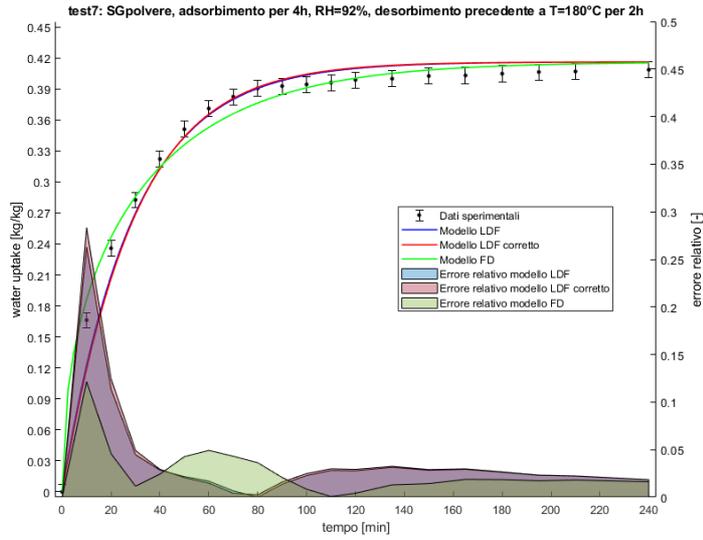


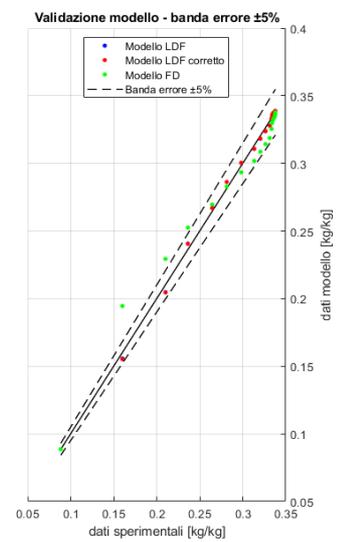
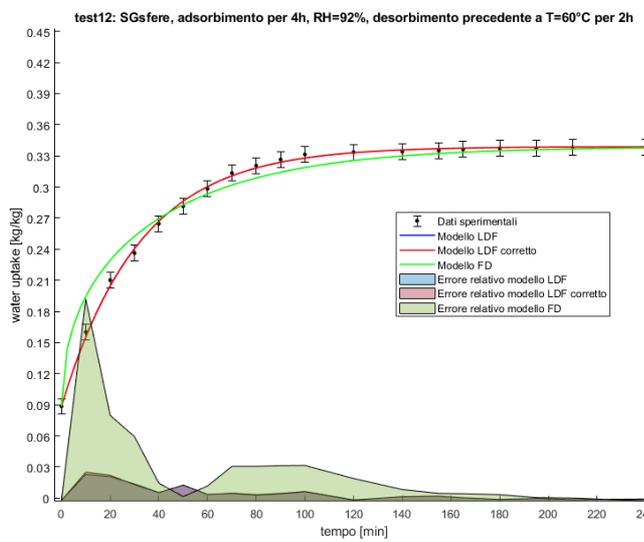
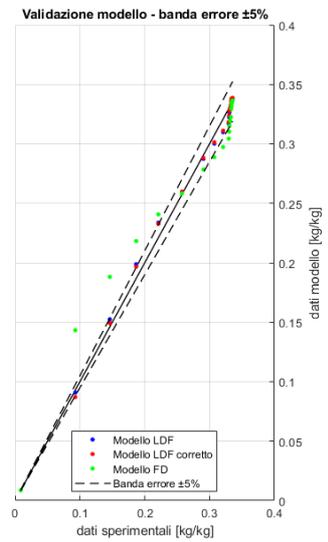
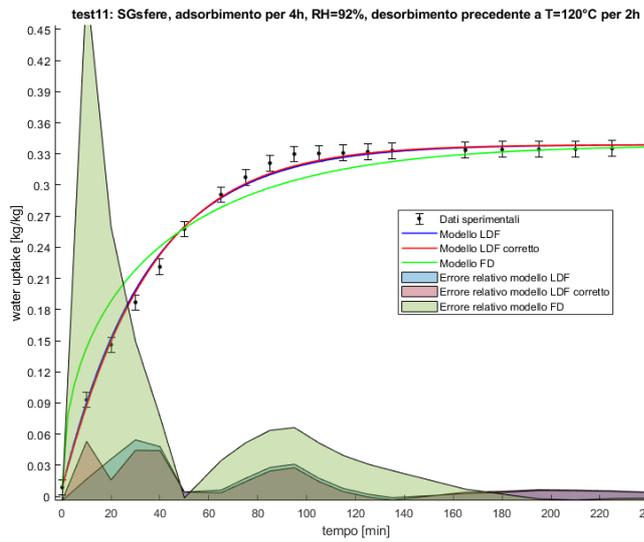
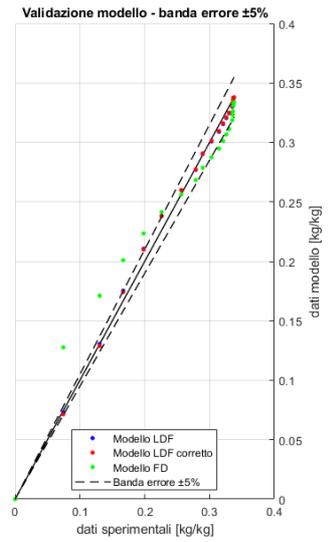
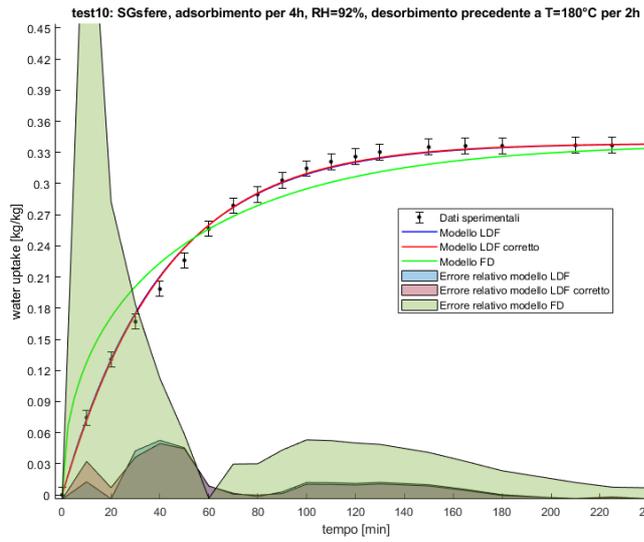




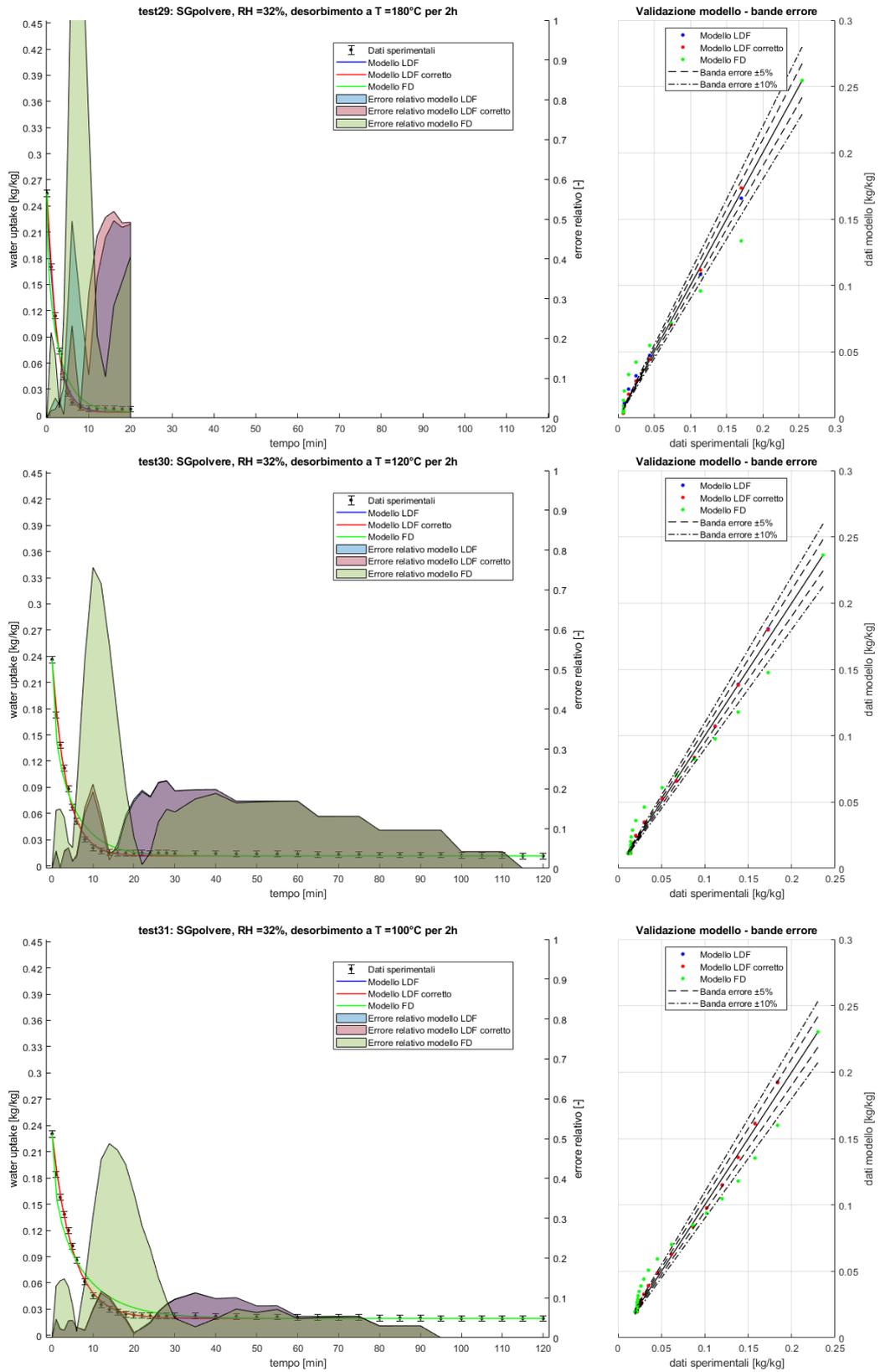


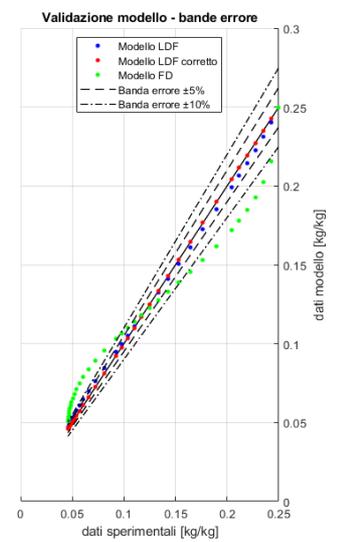
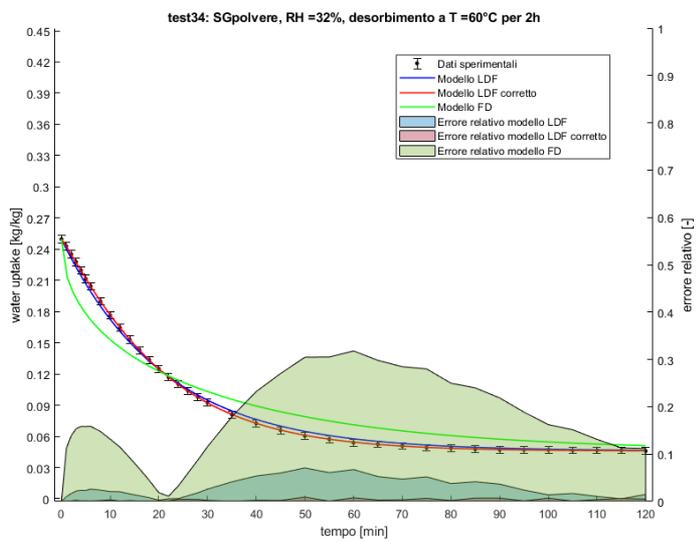
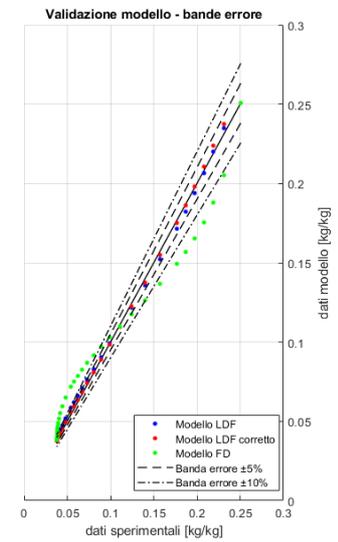
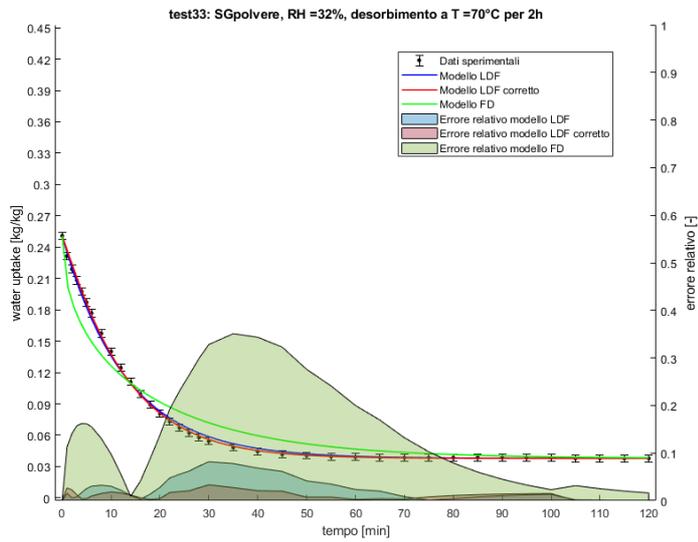
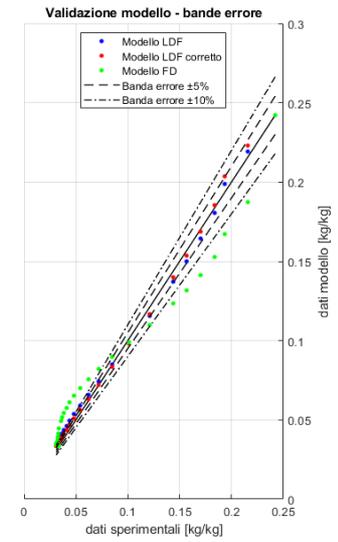
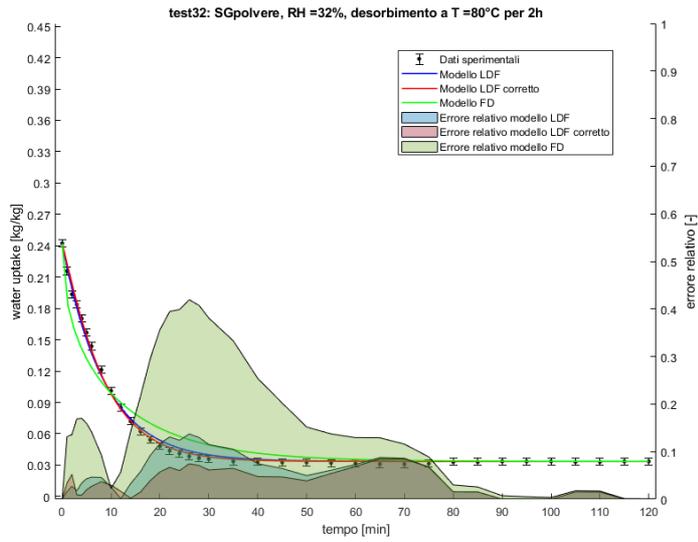


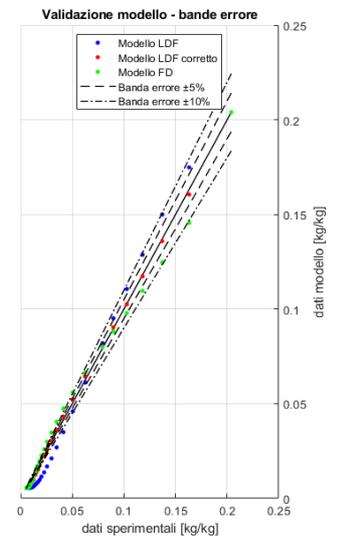
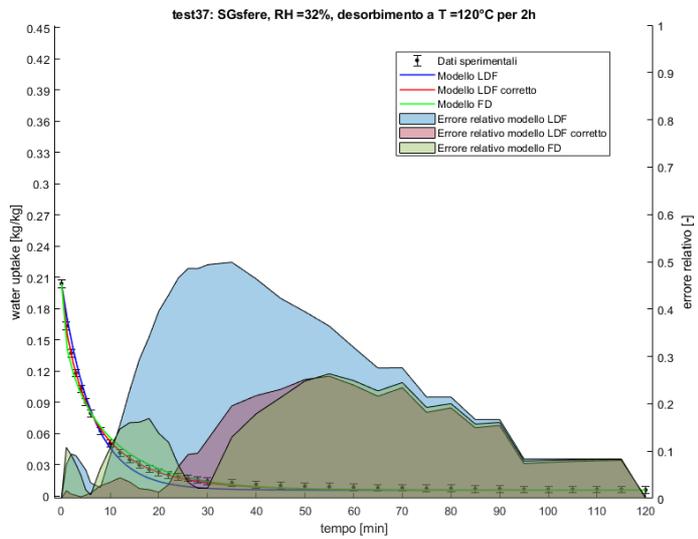
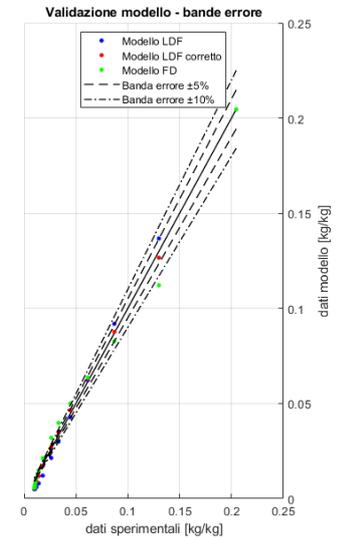
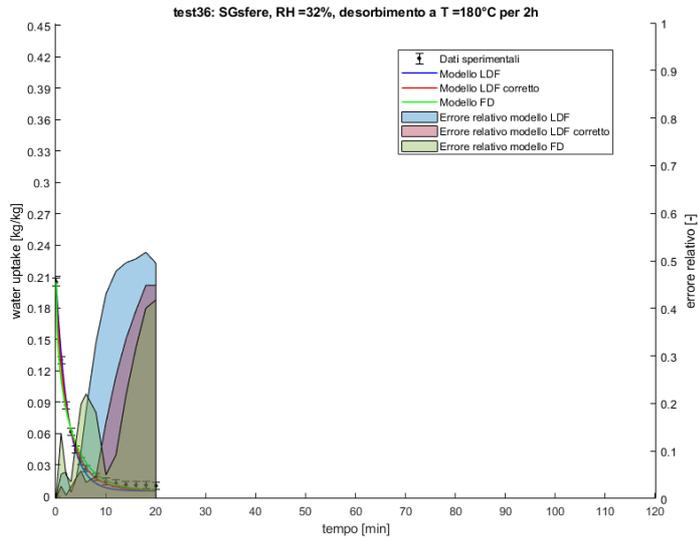
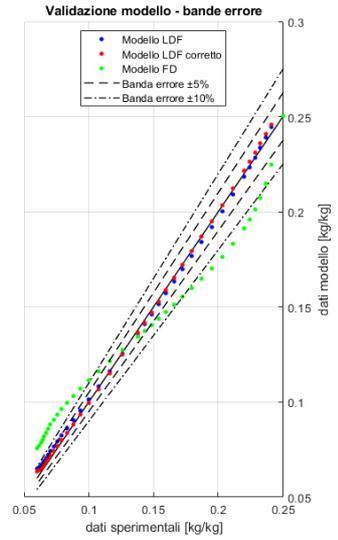
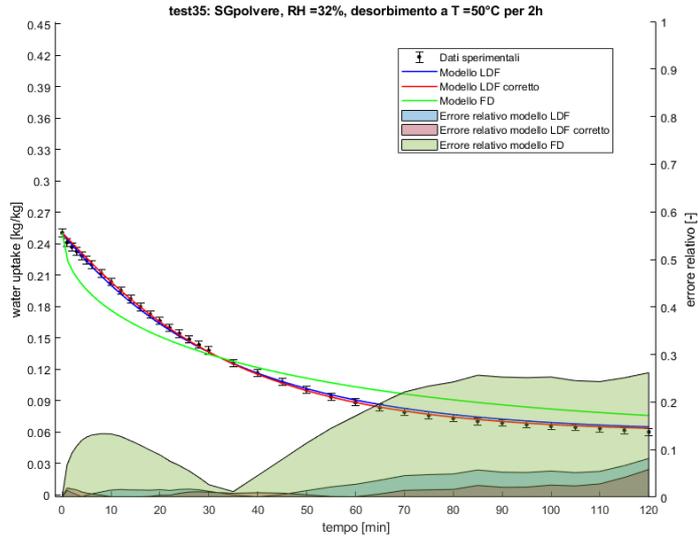


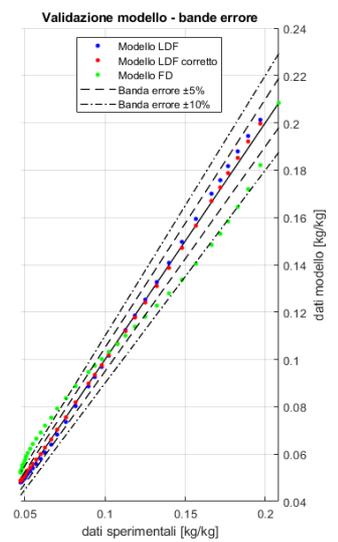
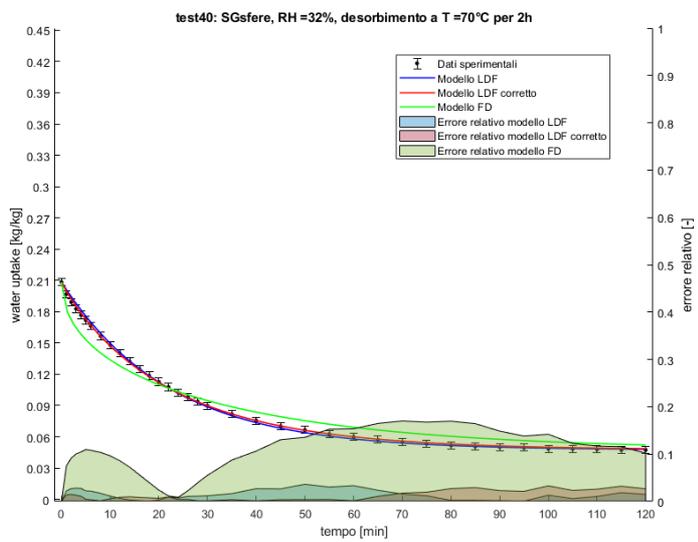
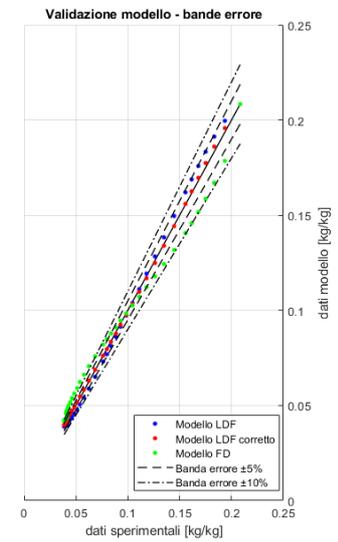
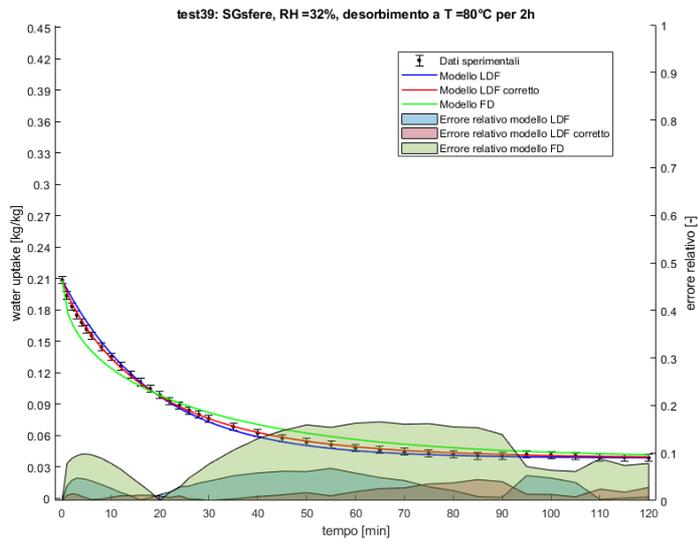
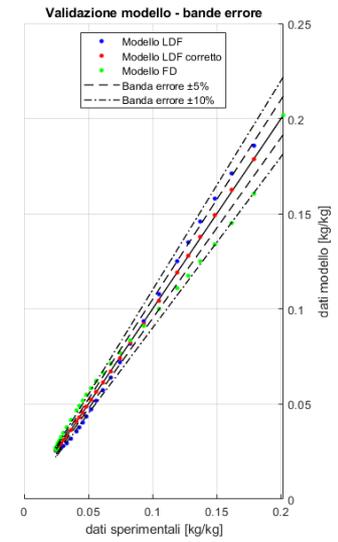
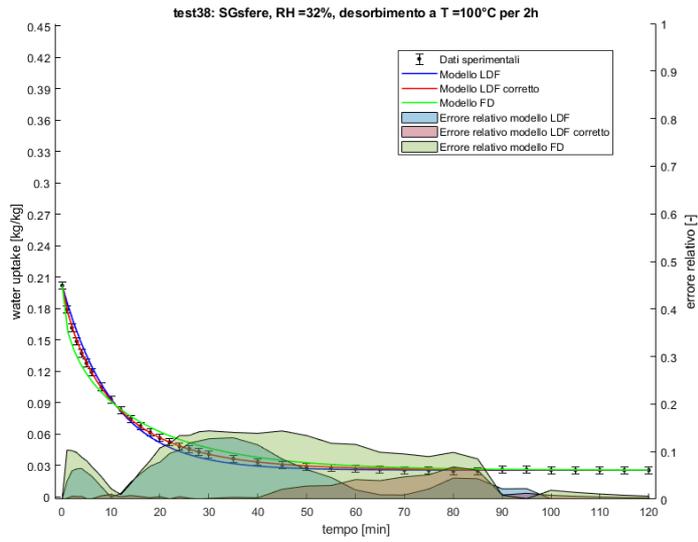


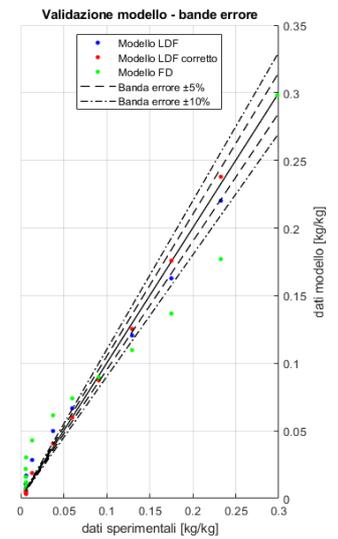
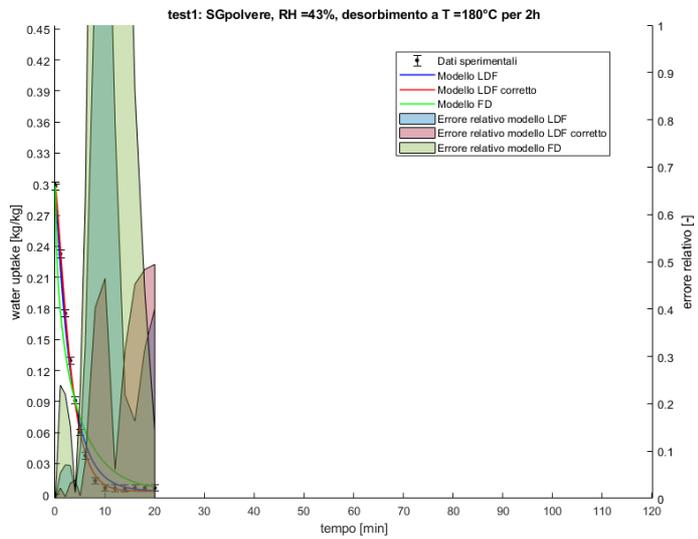
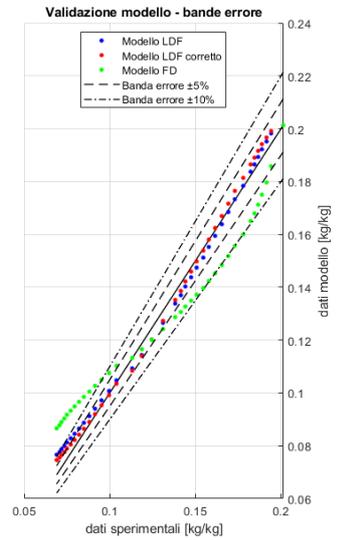
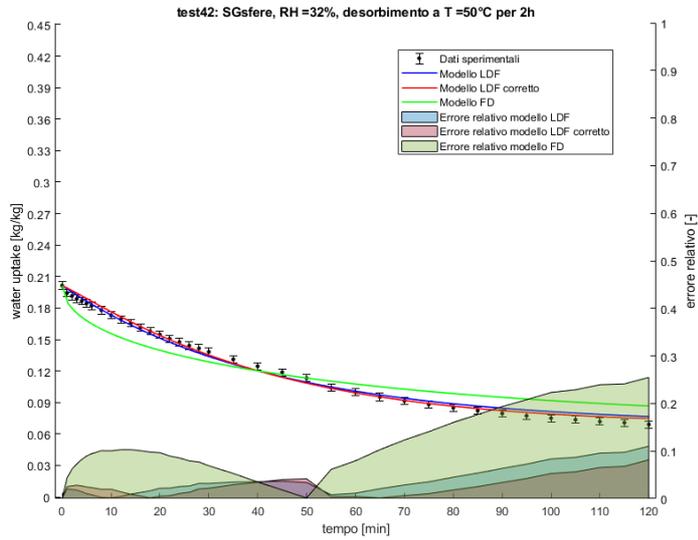
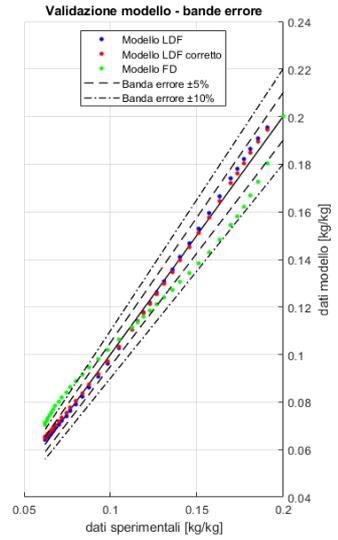
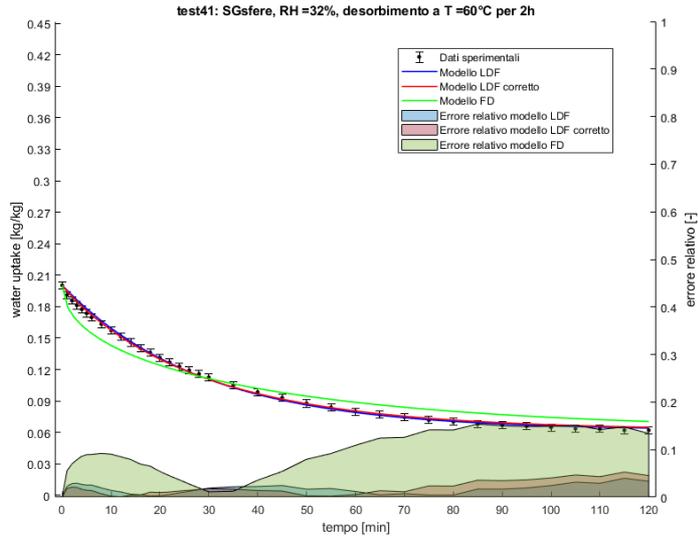
## A.4. Test di desorbimento dei materiali: dati sperimentali e modellazione

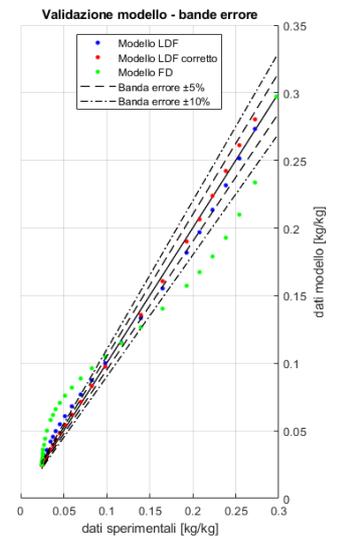
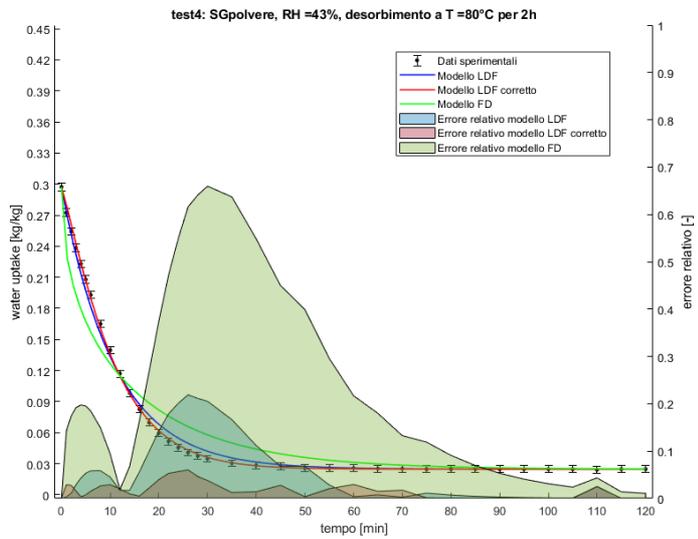
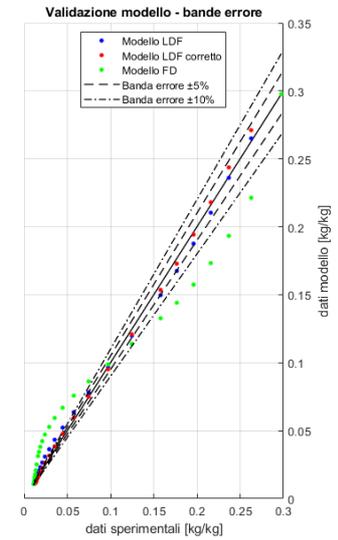
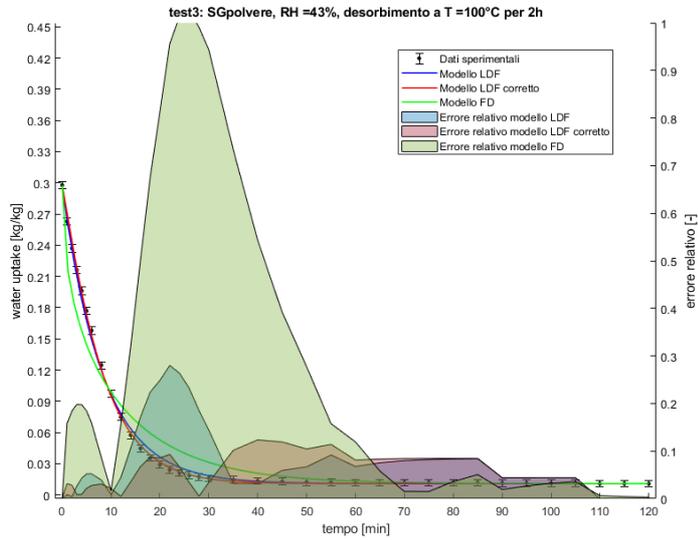
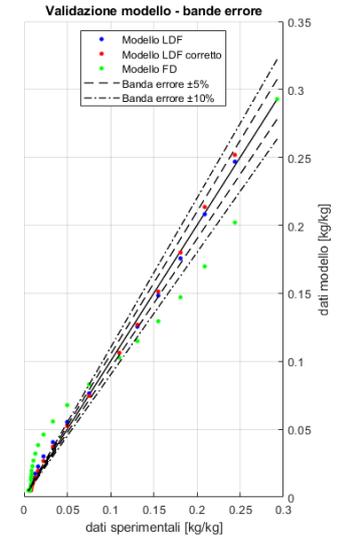
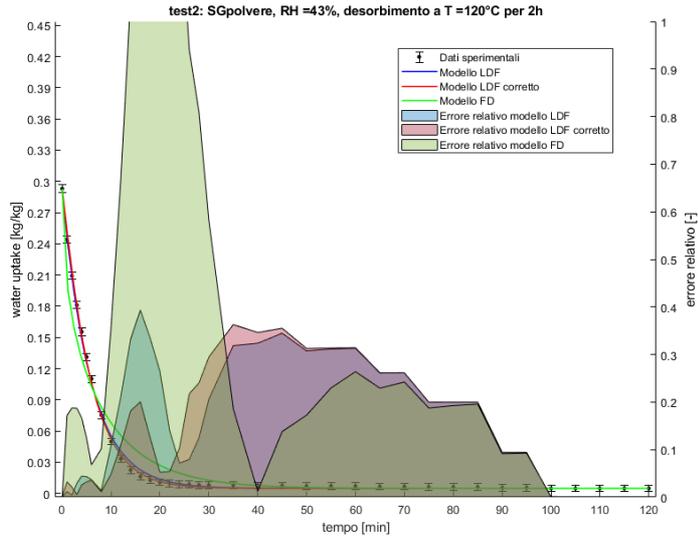


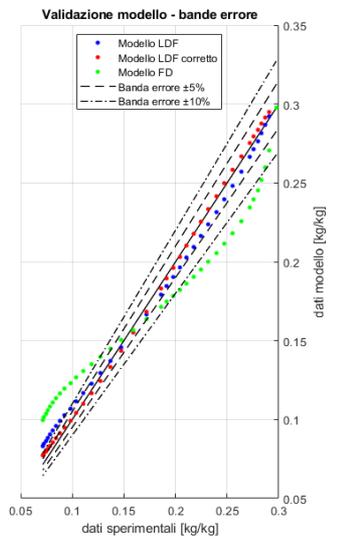
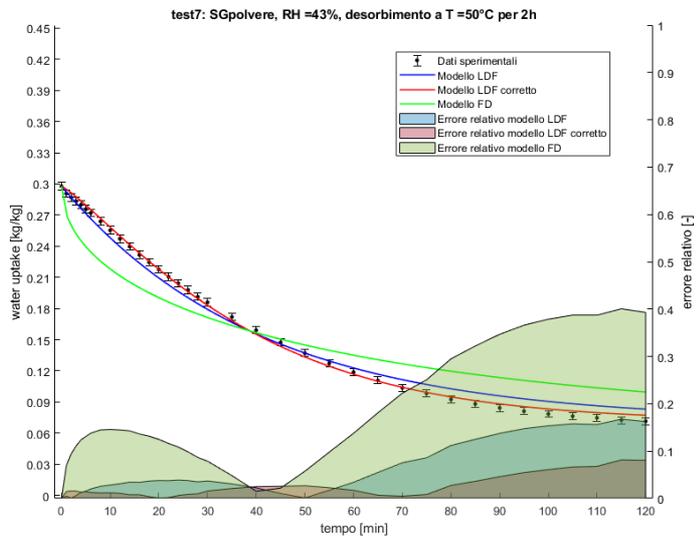
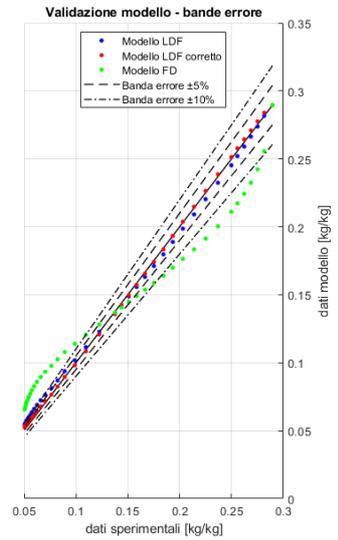
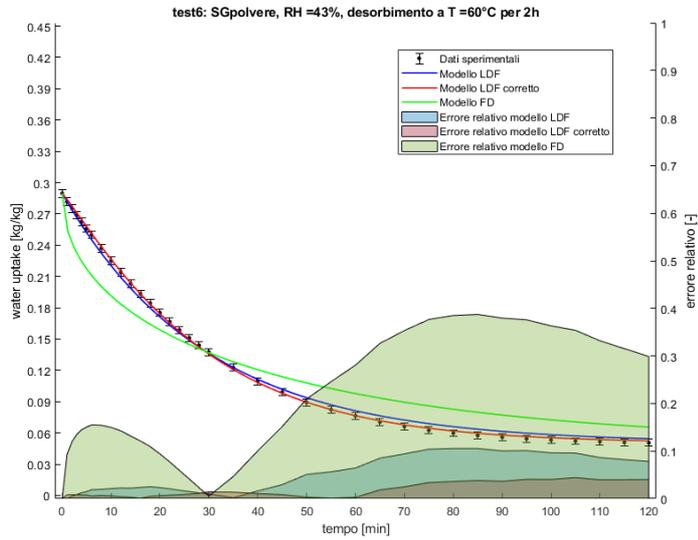
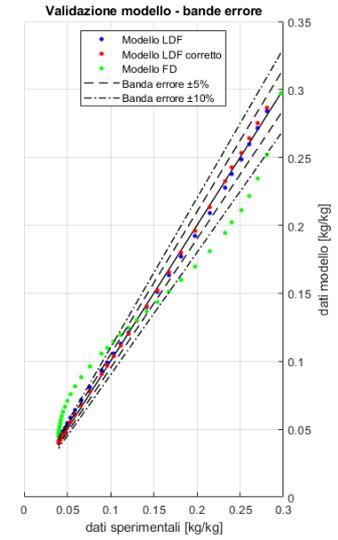
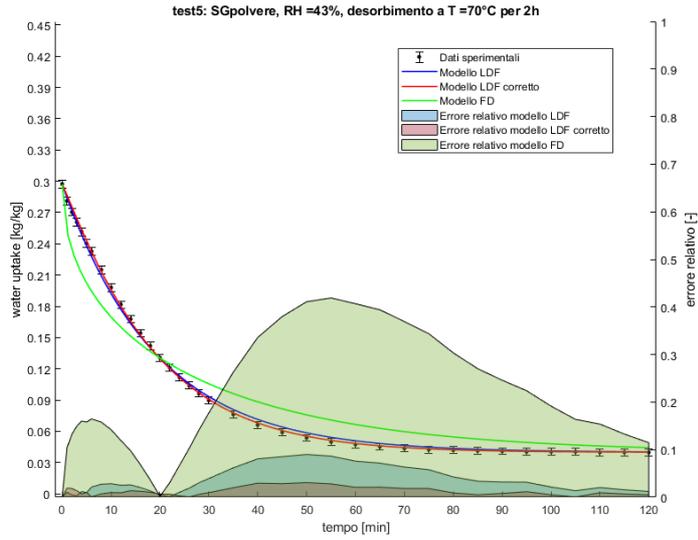


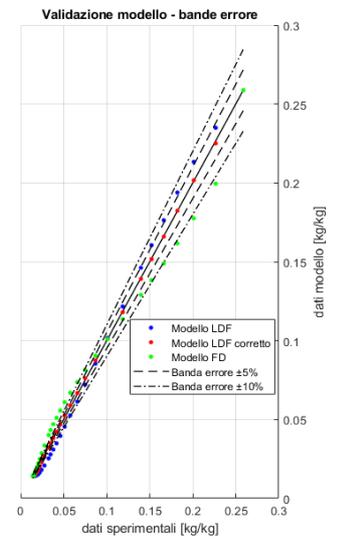
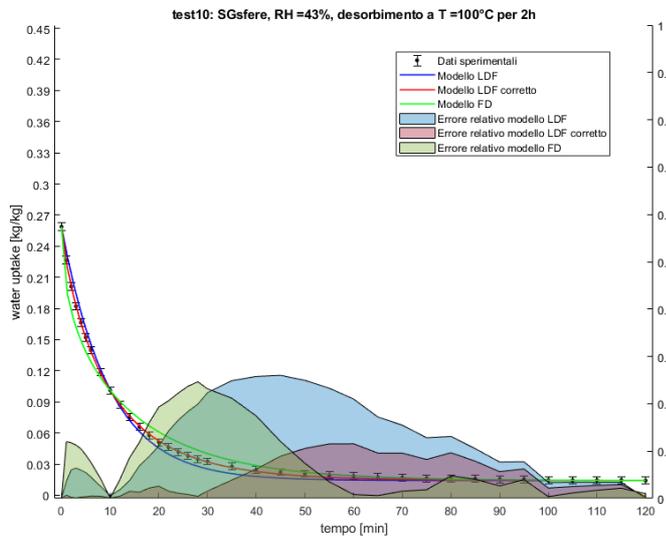
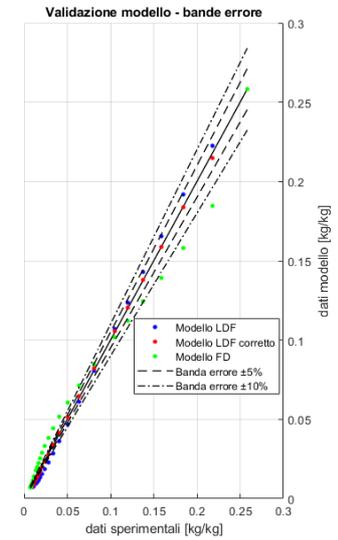
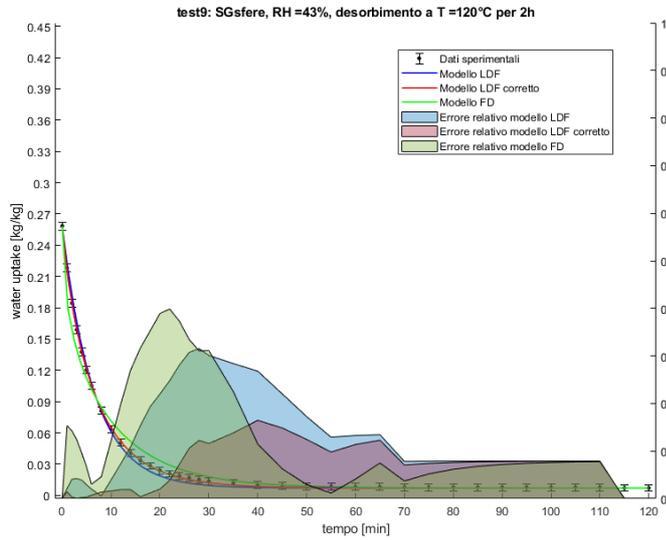
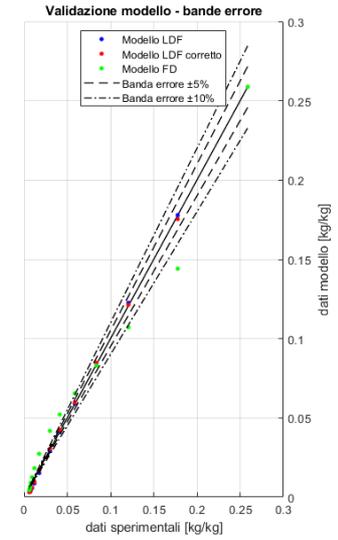
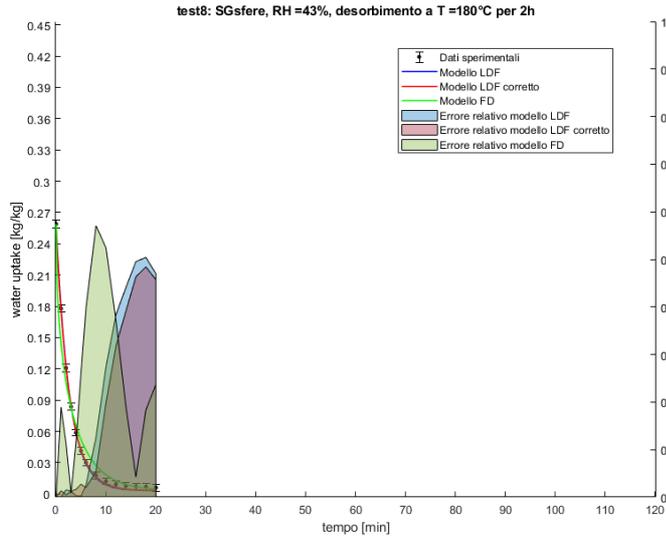


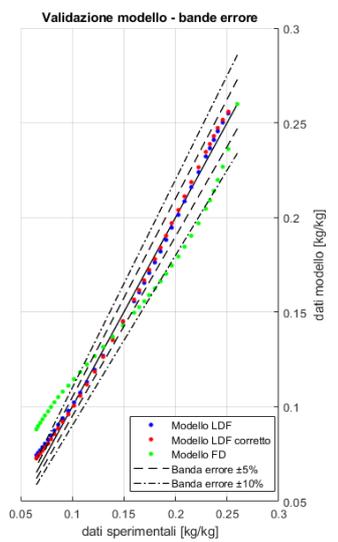
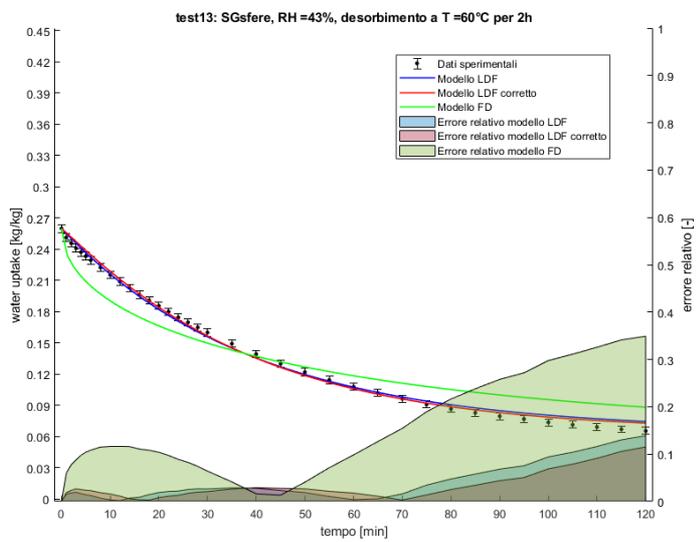
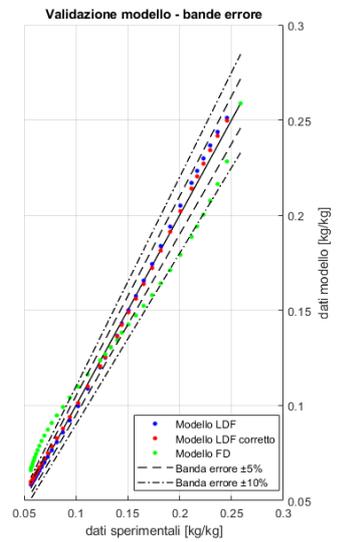
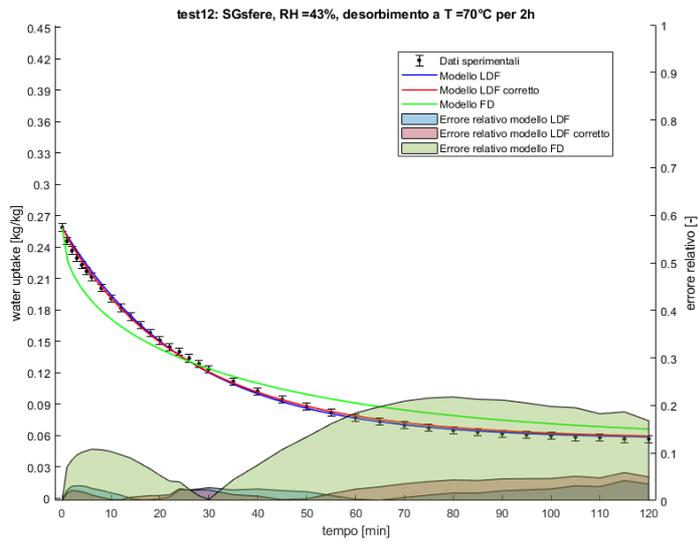
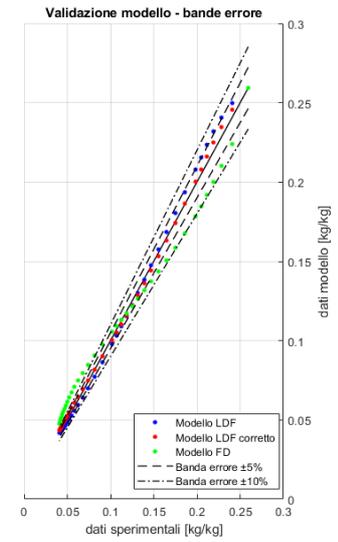
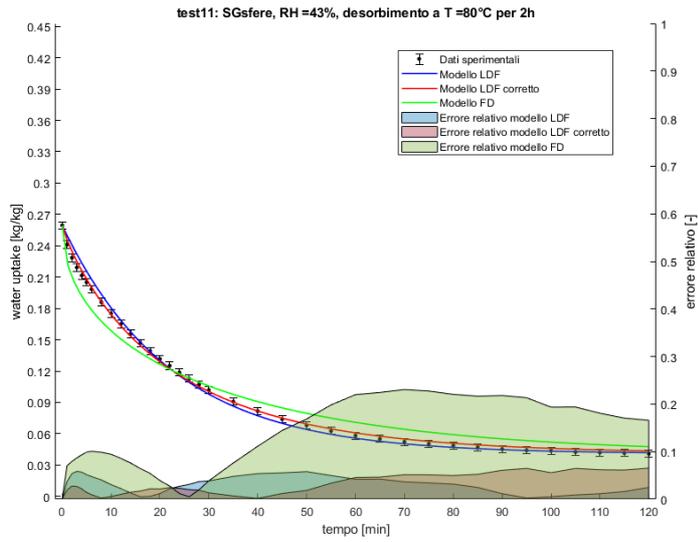


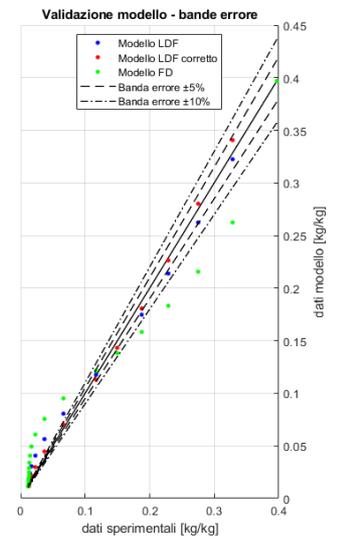
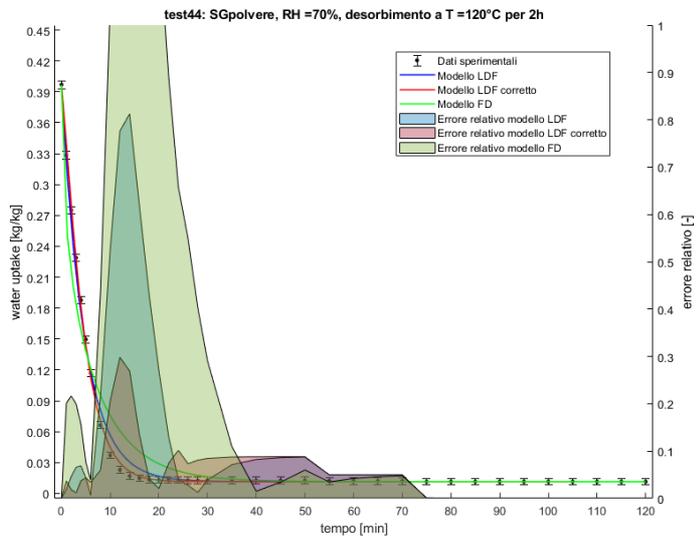
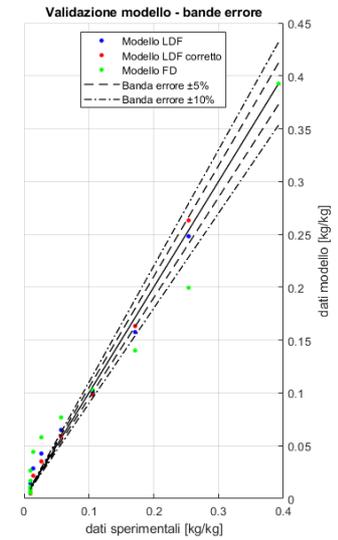
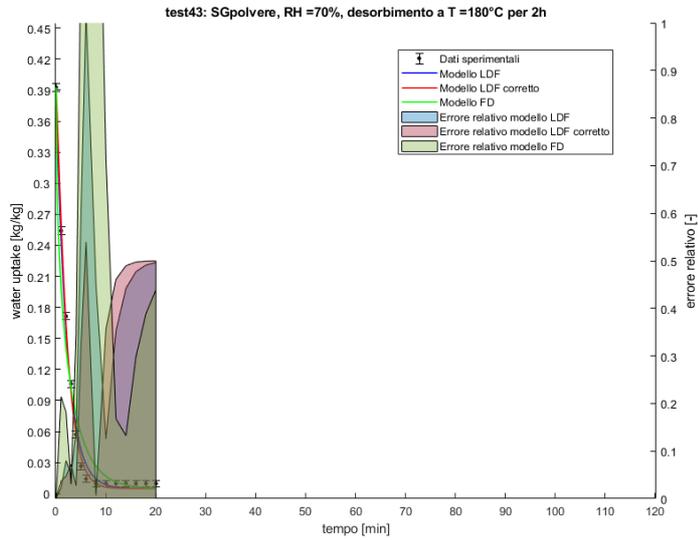
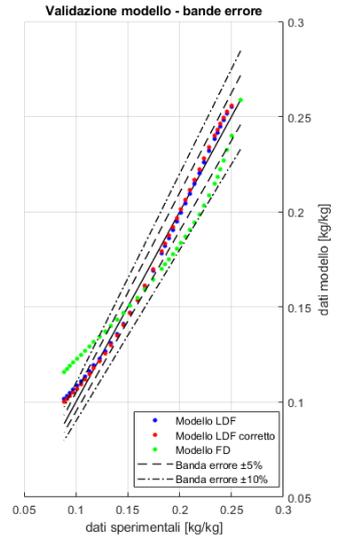
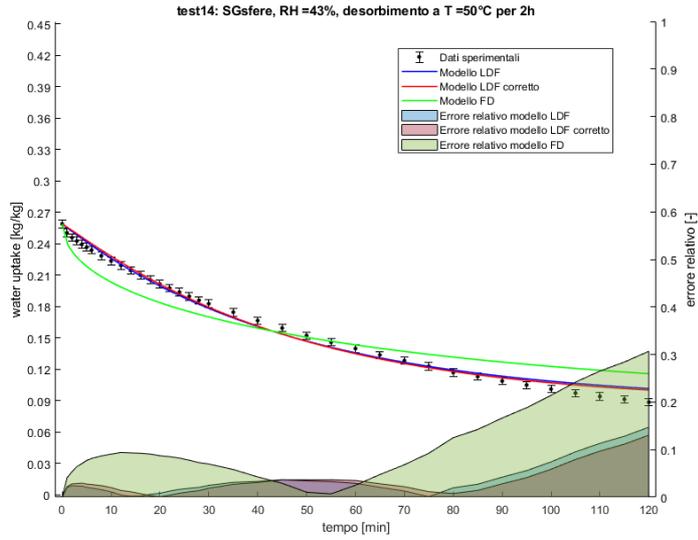


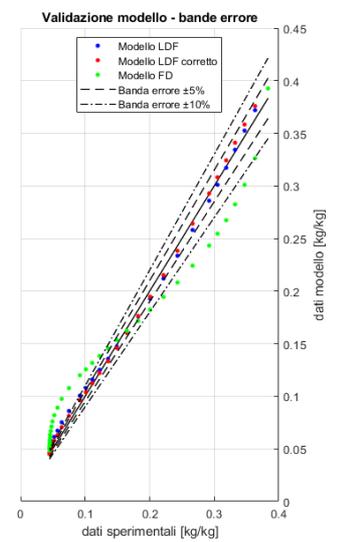
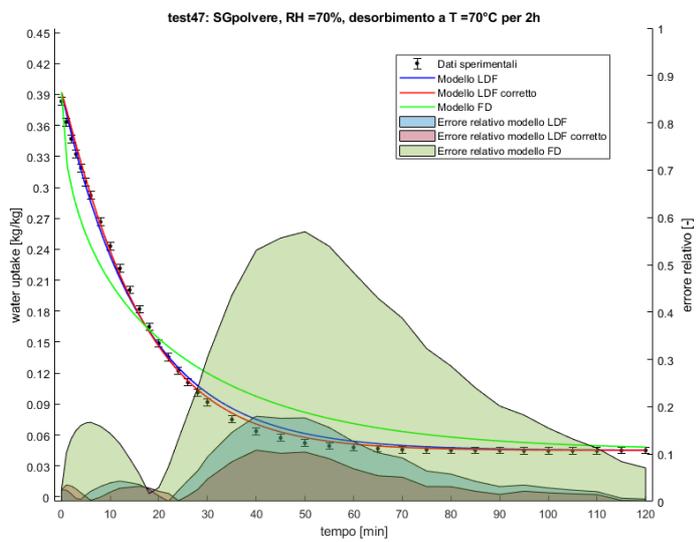
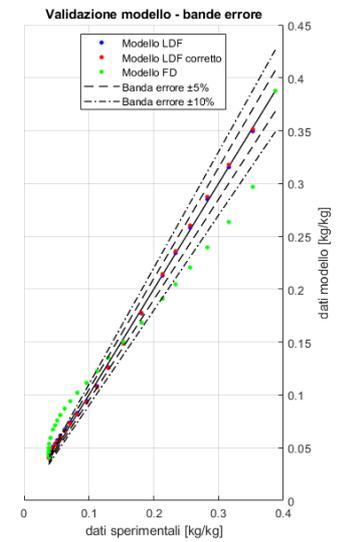
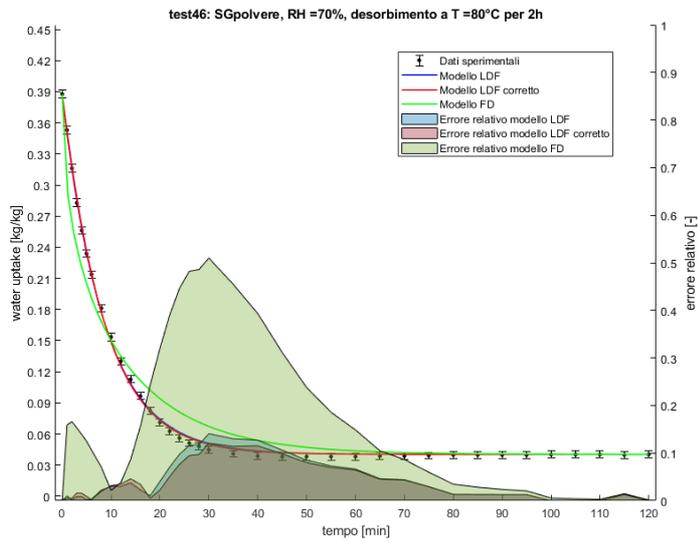
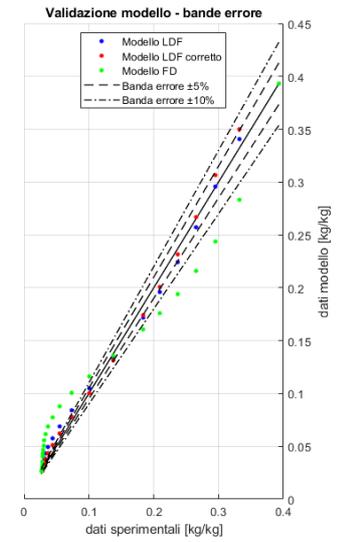
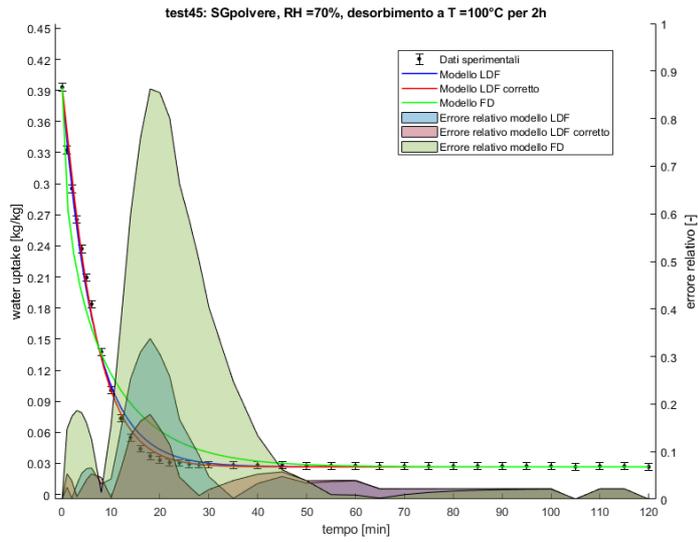


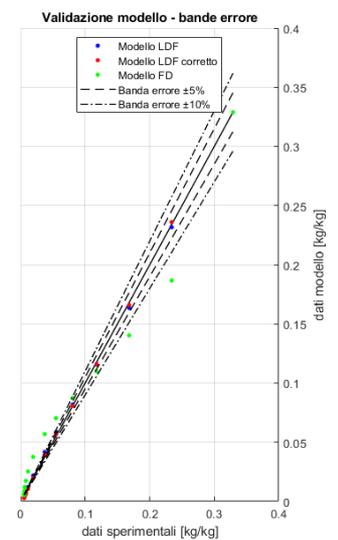
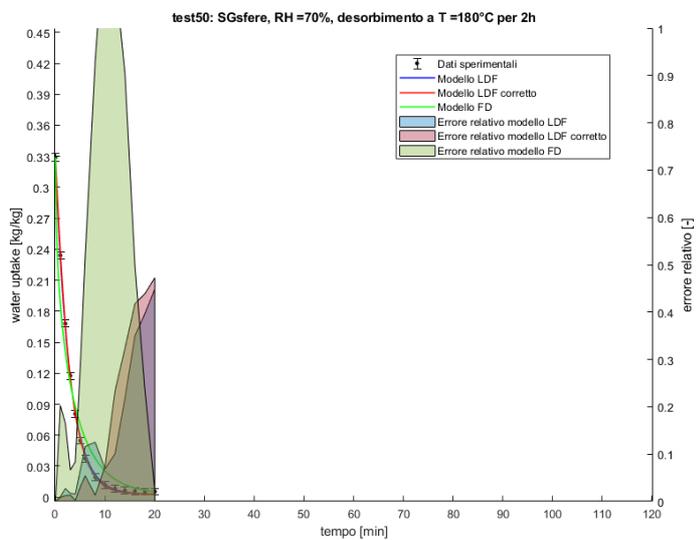
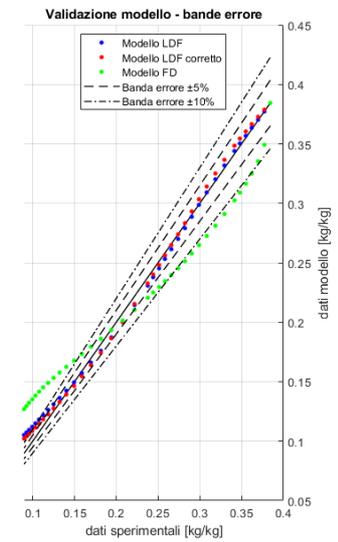
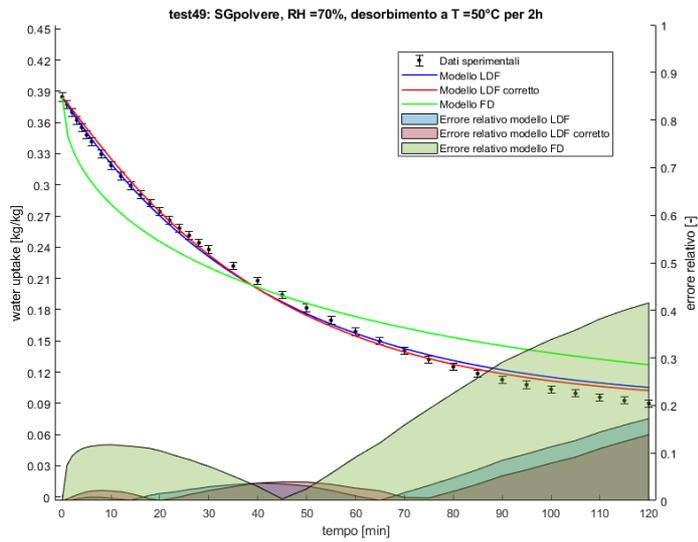
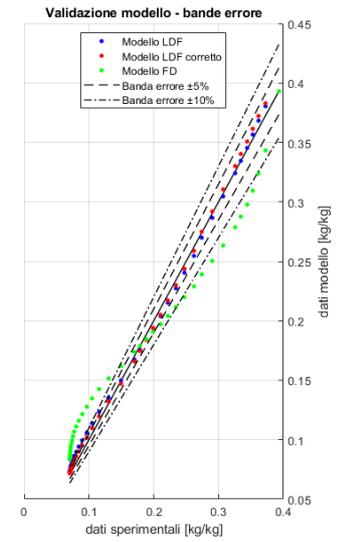
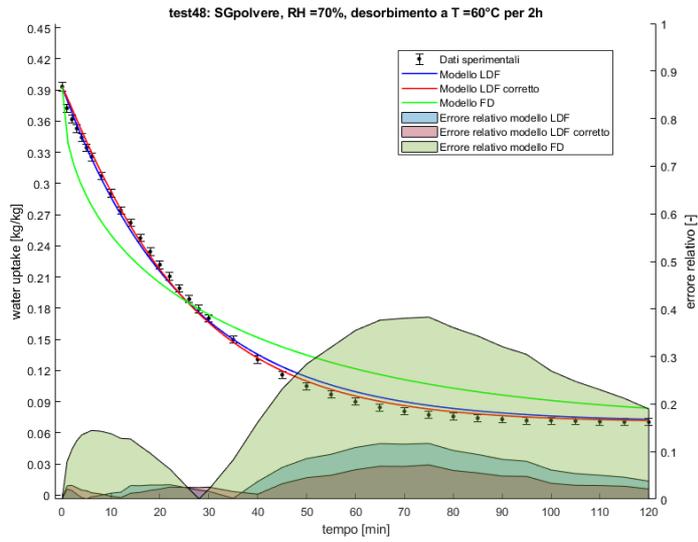


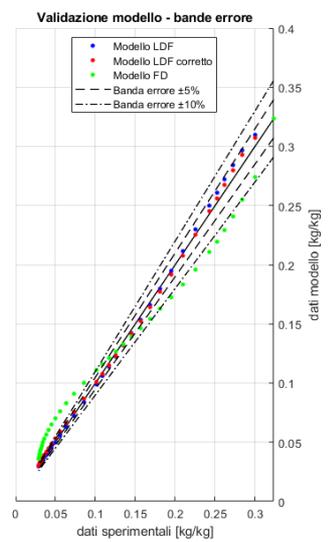
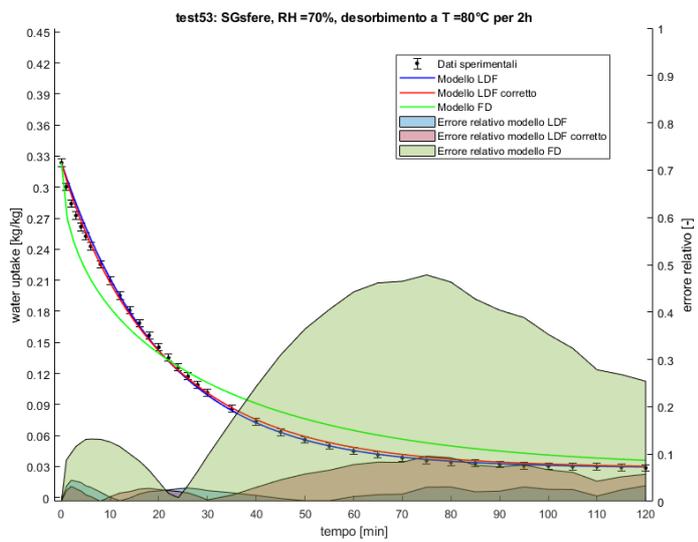
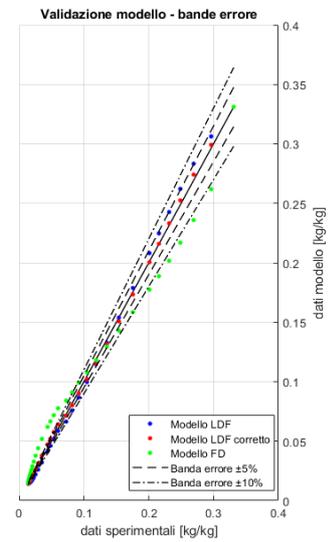
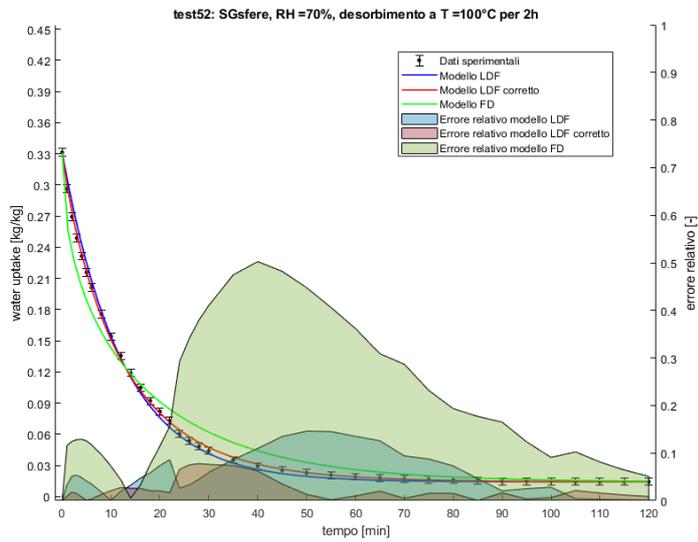
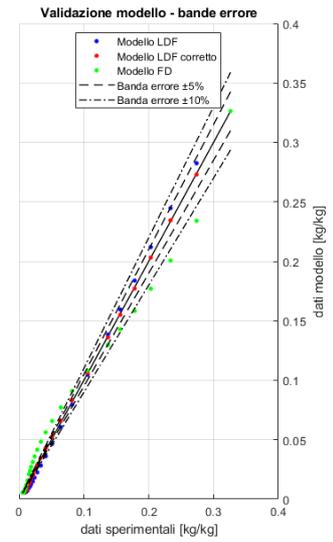
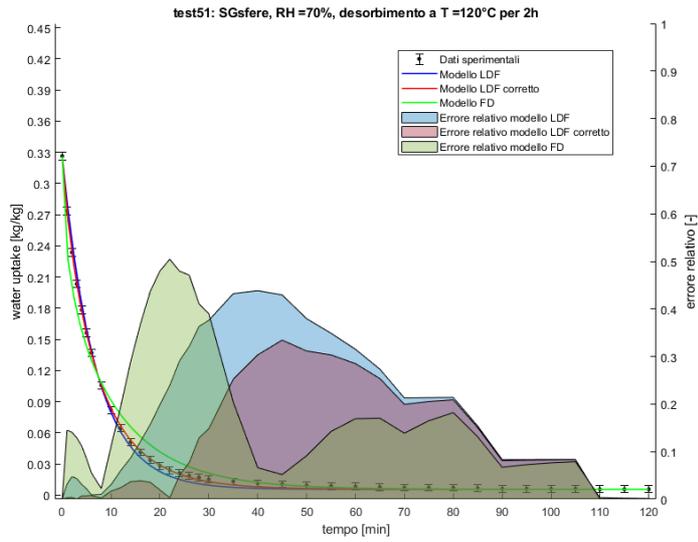


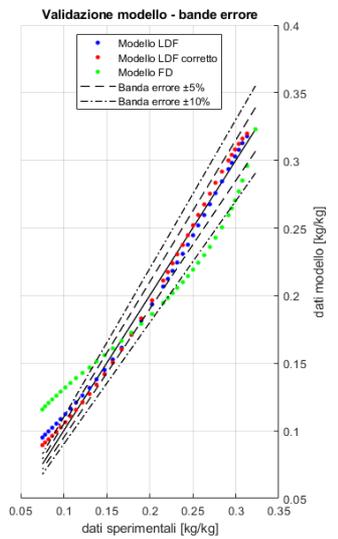
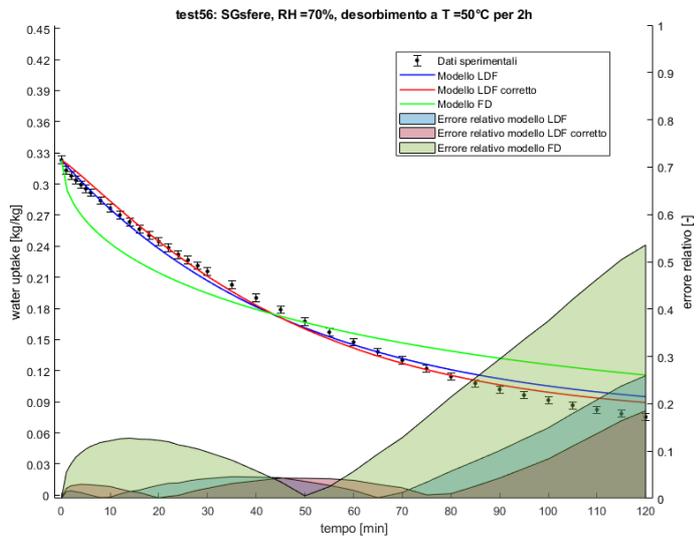
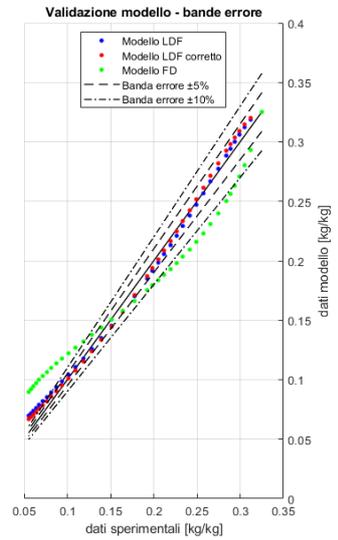
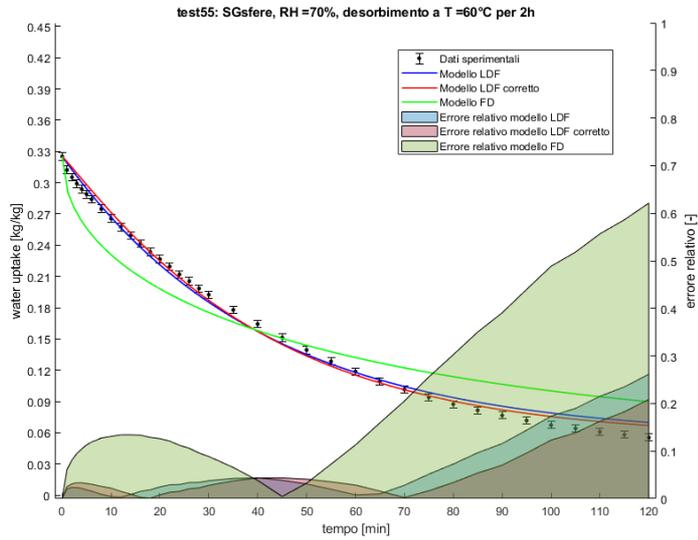
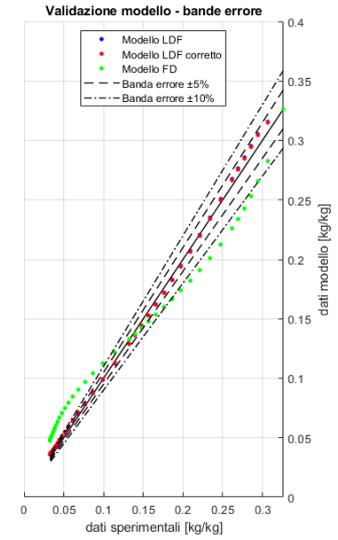
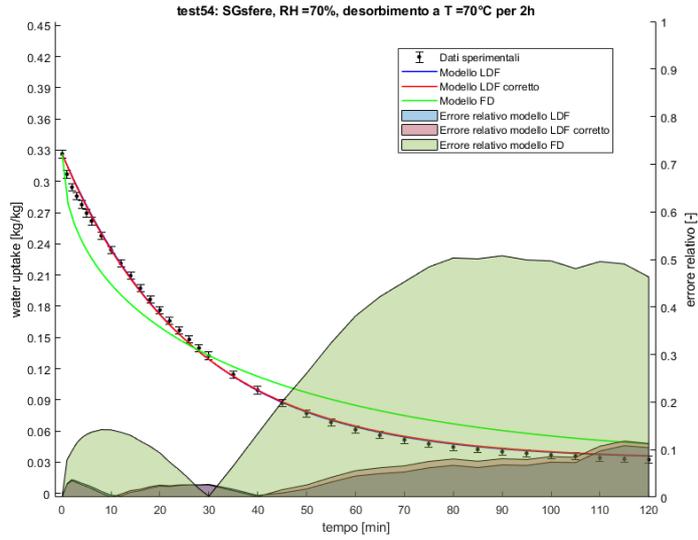


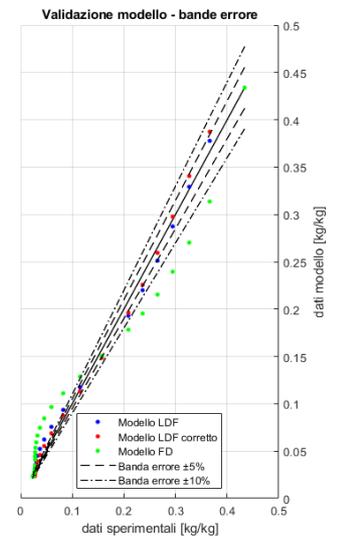
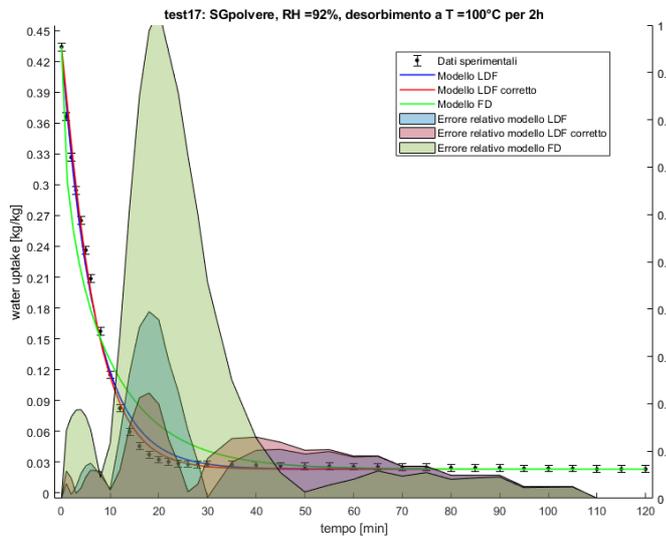
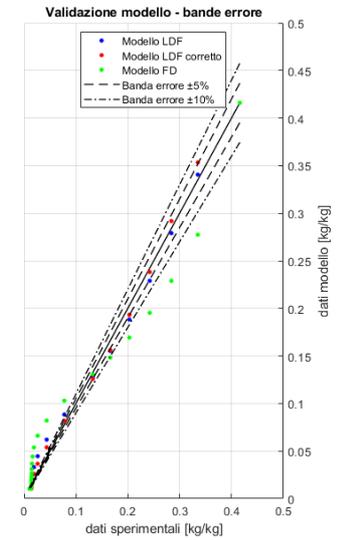
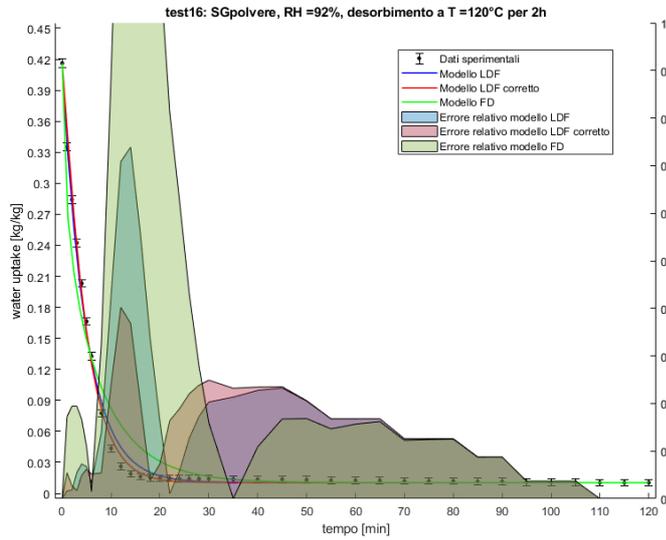
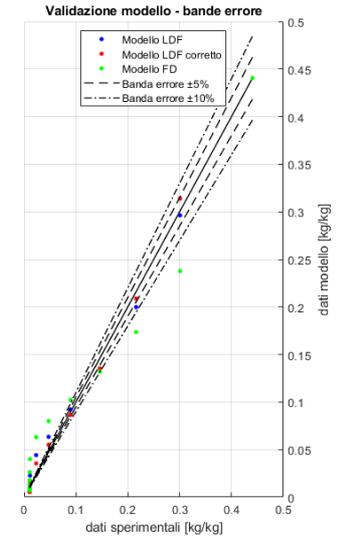
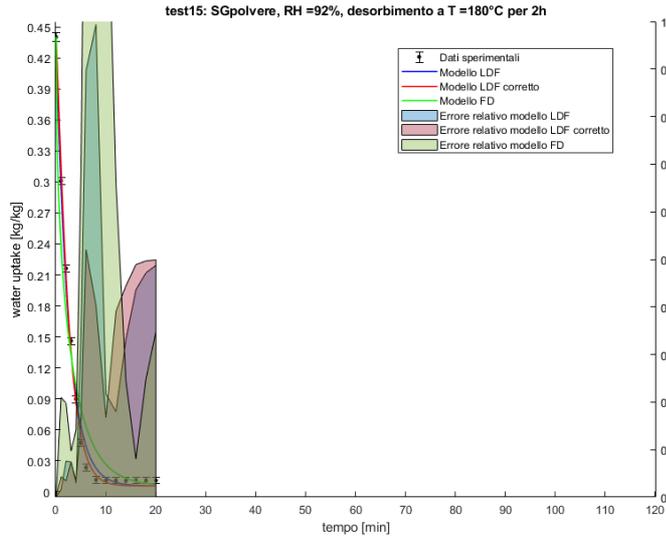


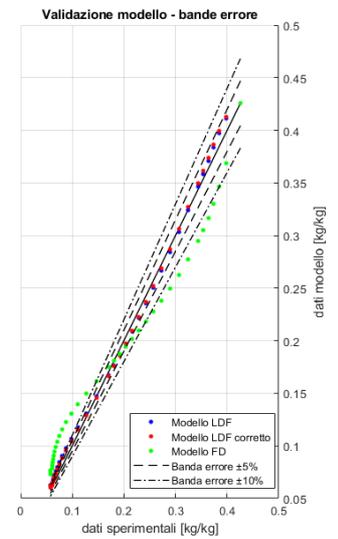
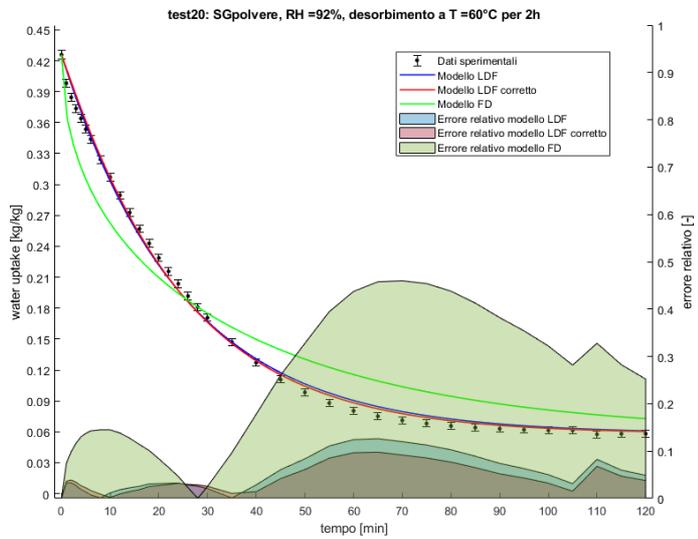
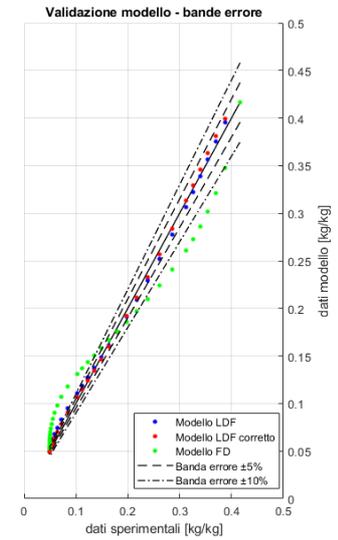
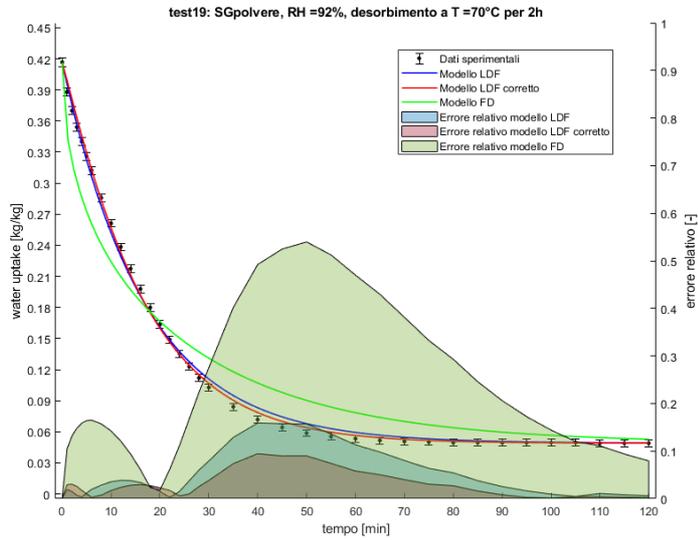
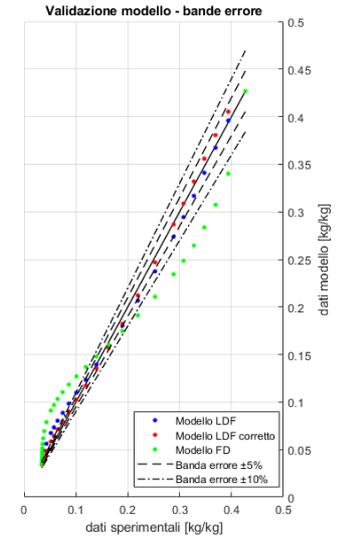
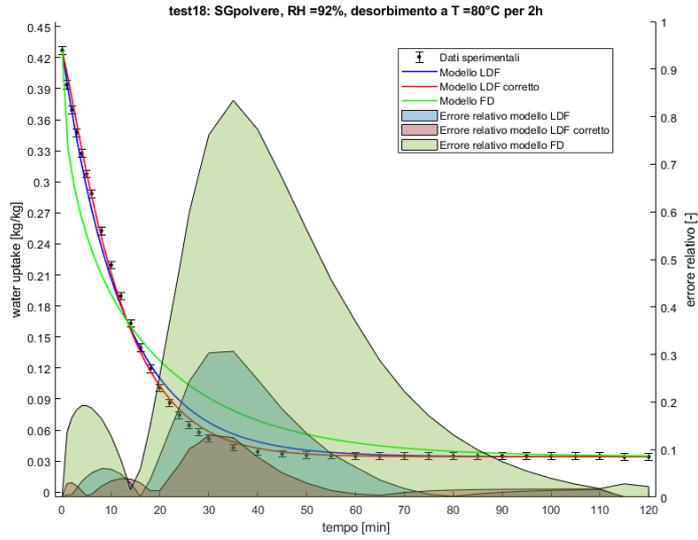


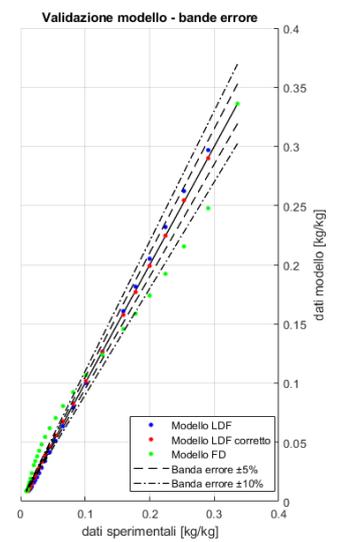
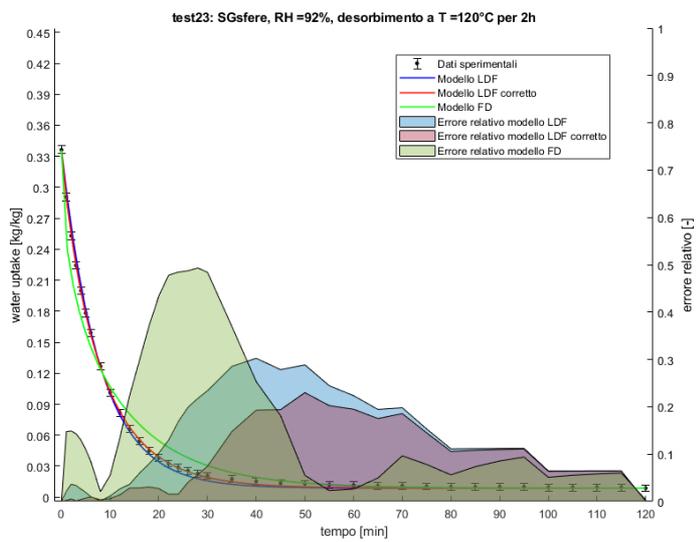
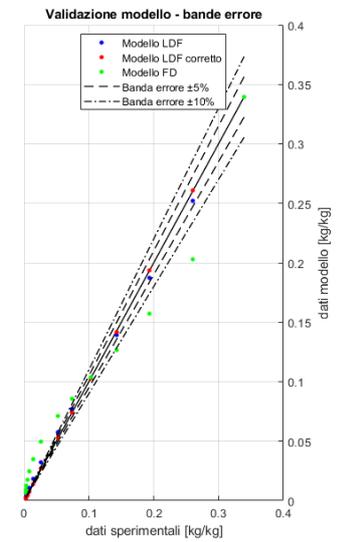
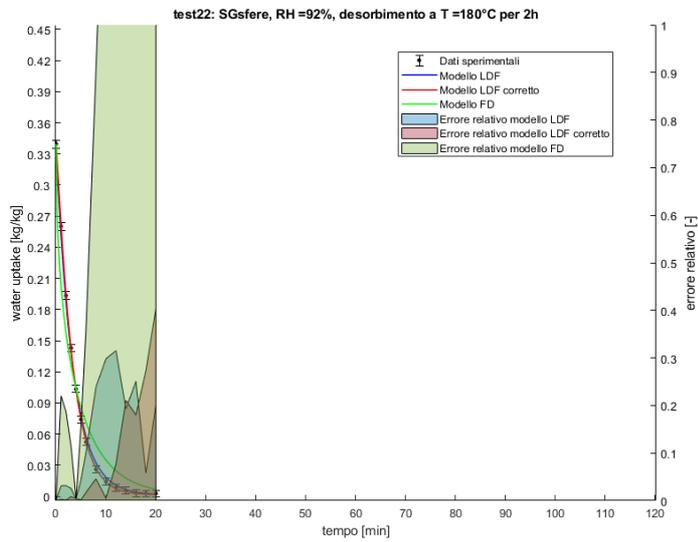
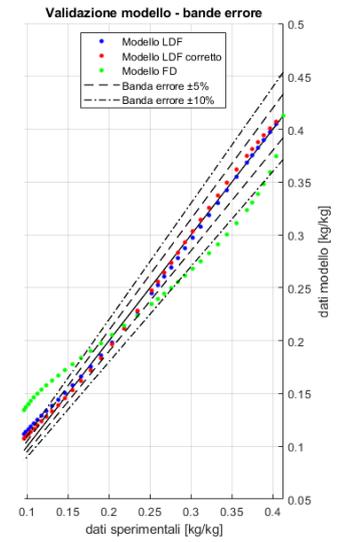
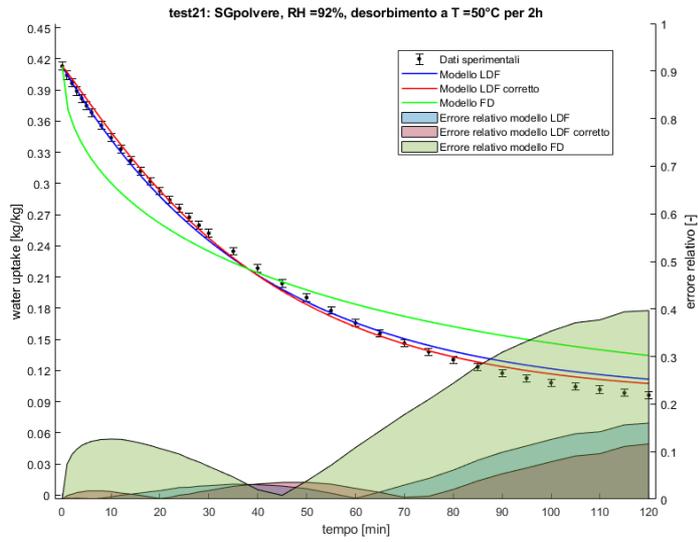


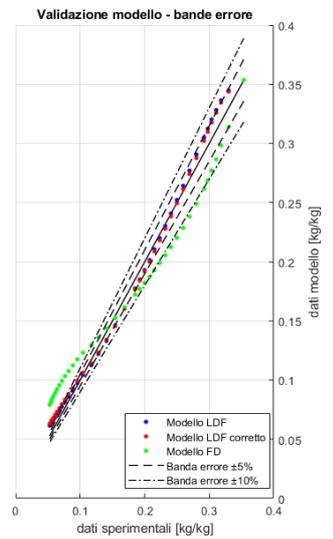
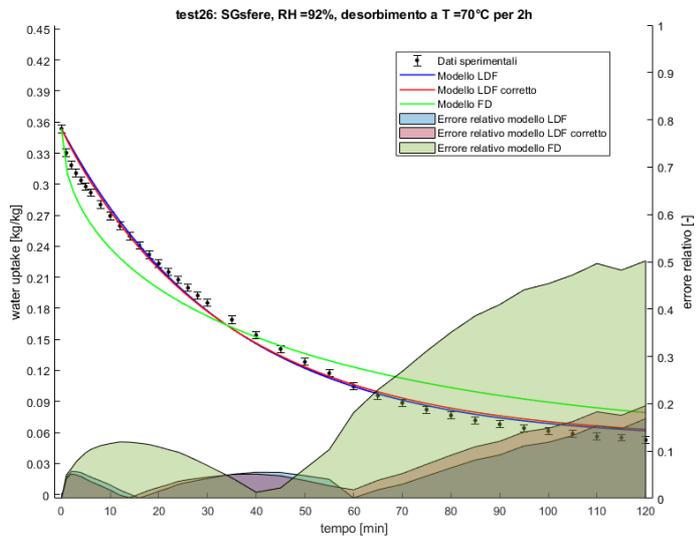
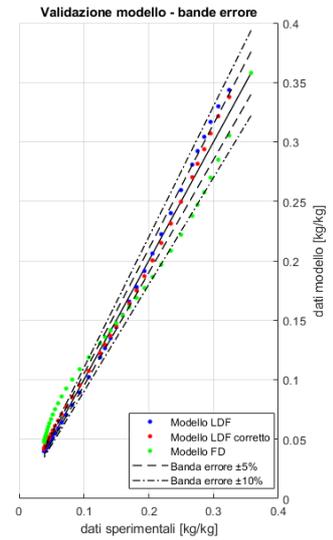
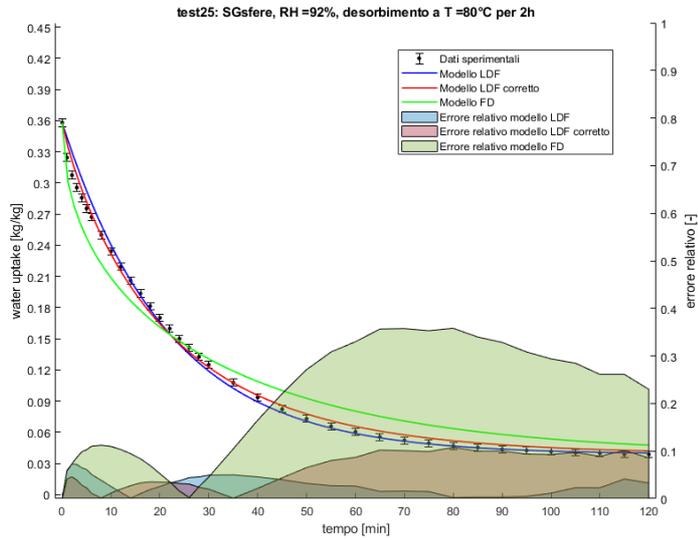
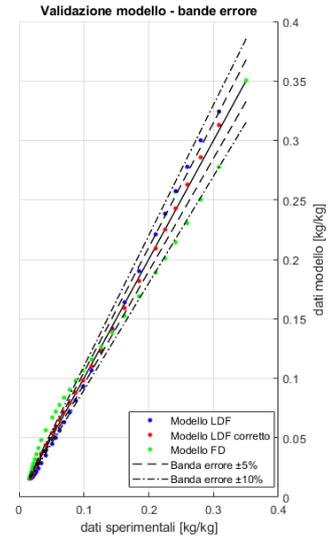
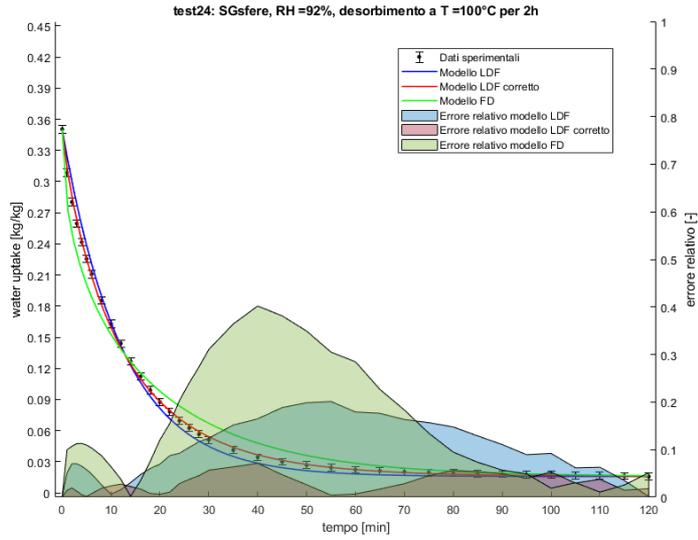


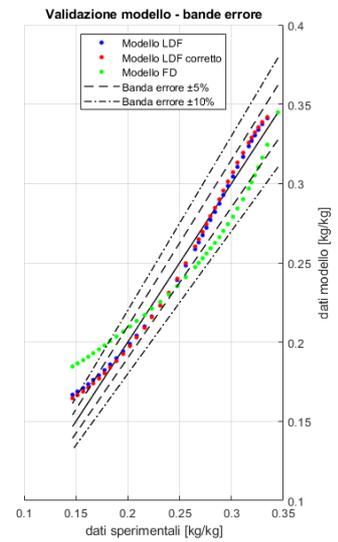
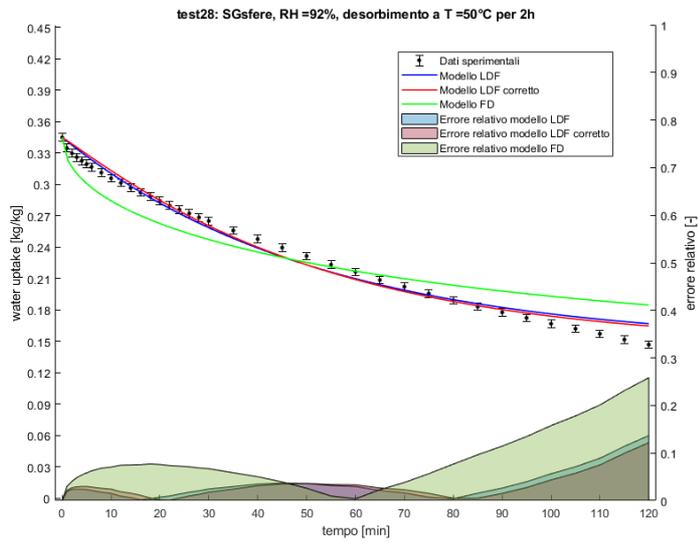
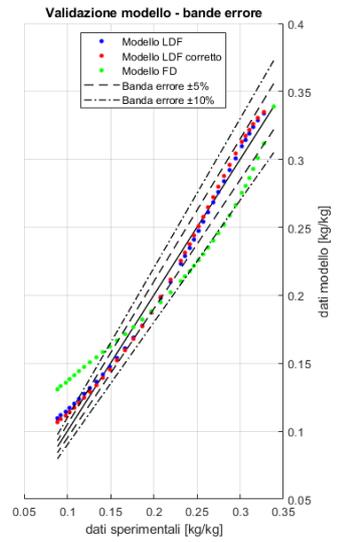
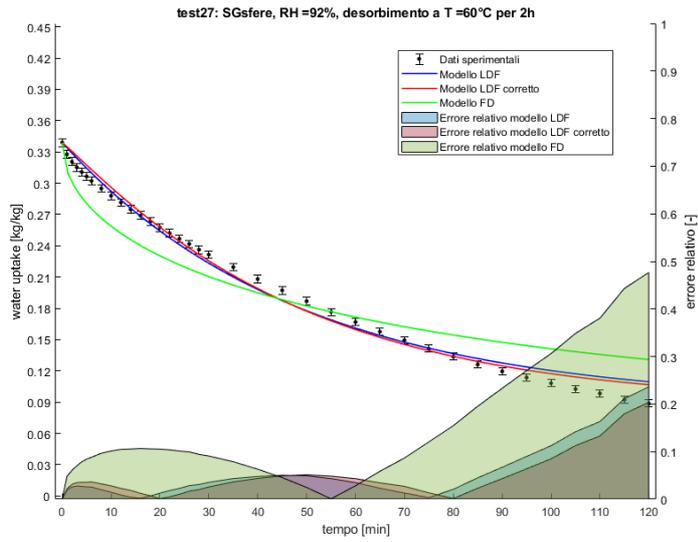




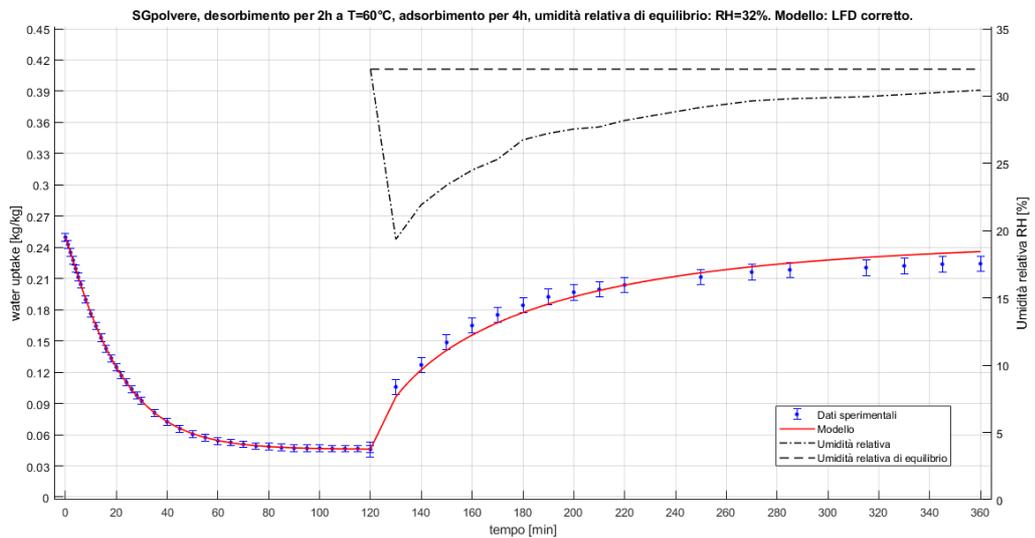
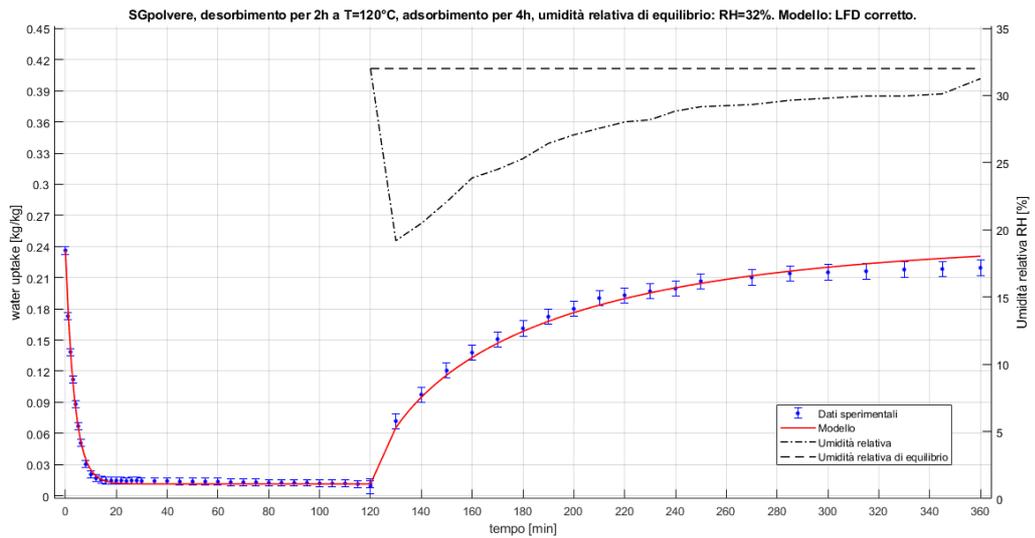
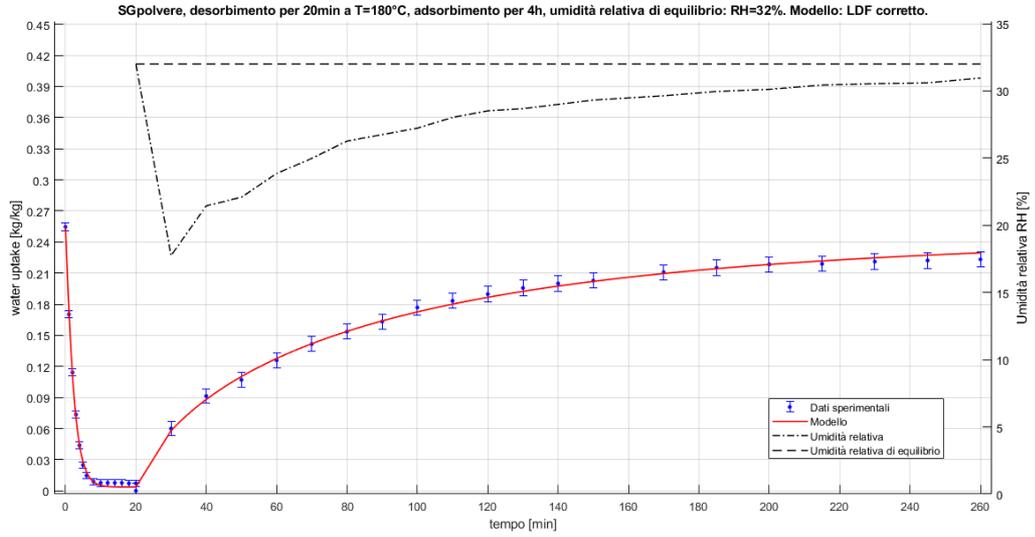


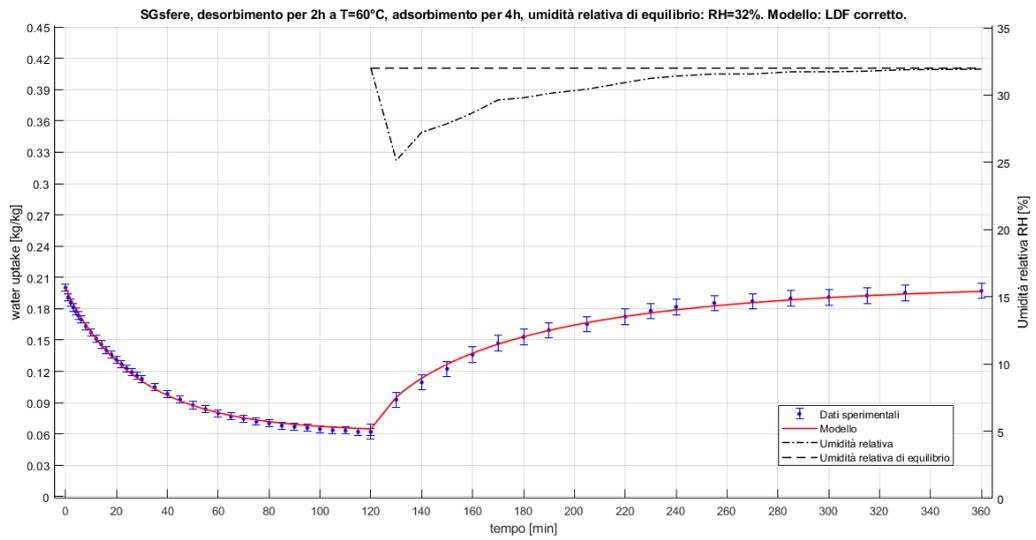
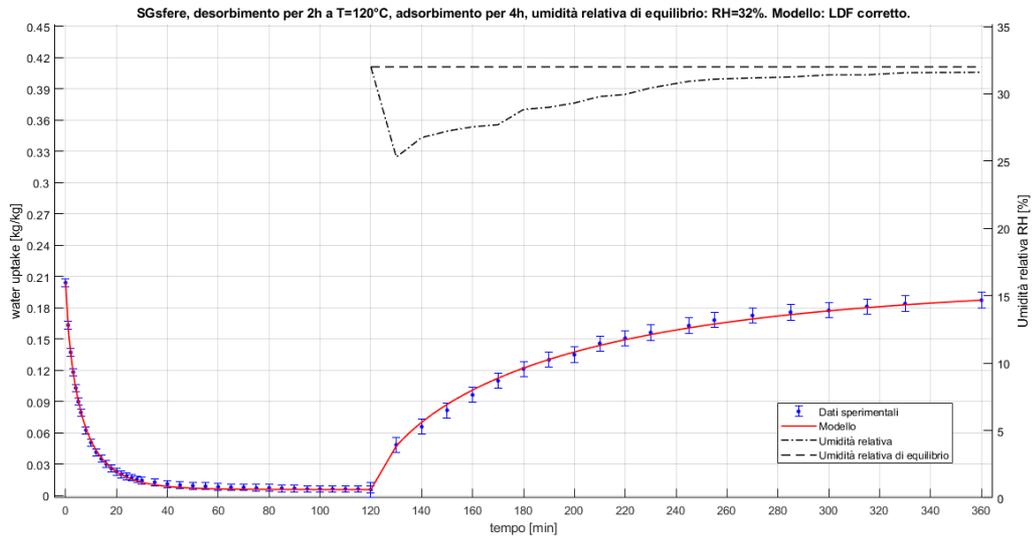
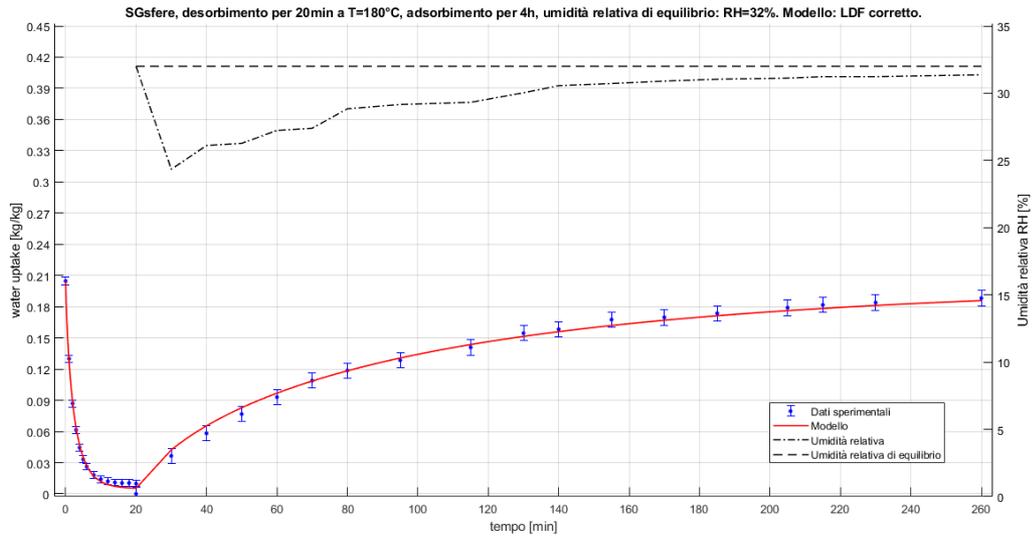


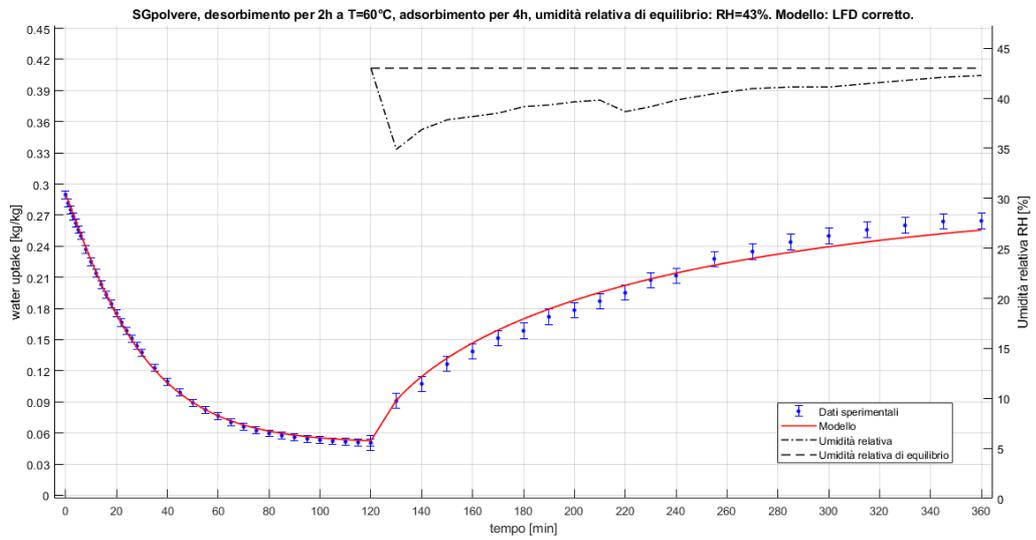
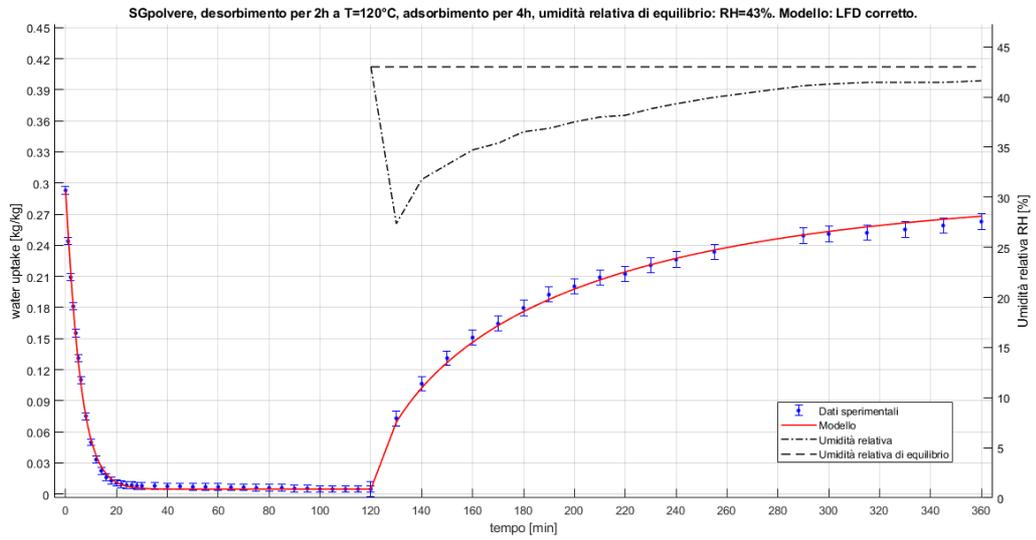
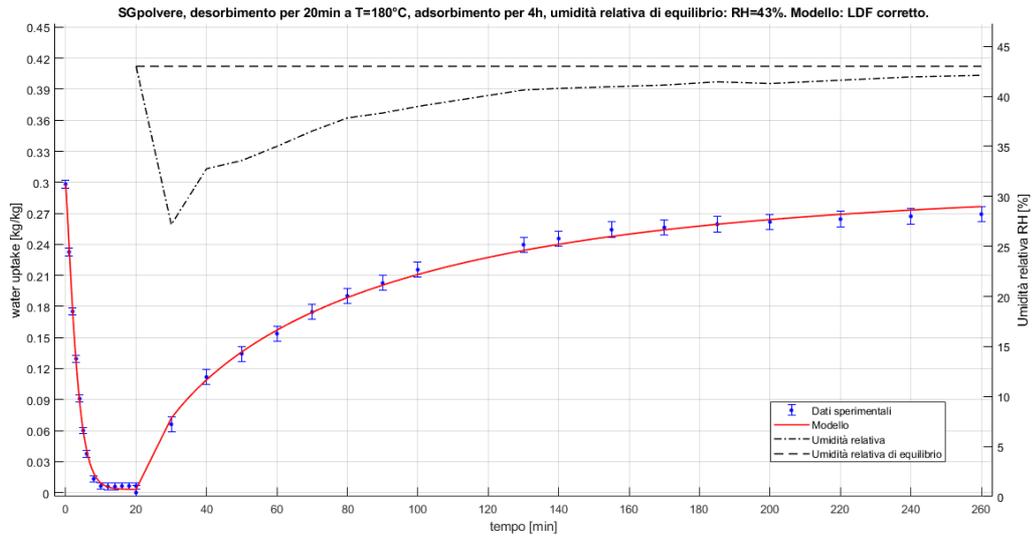


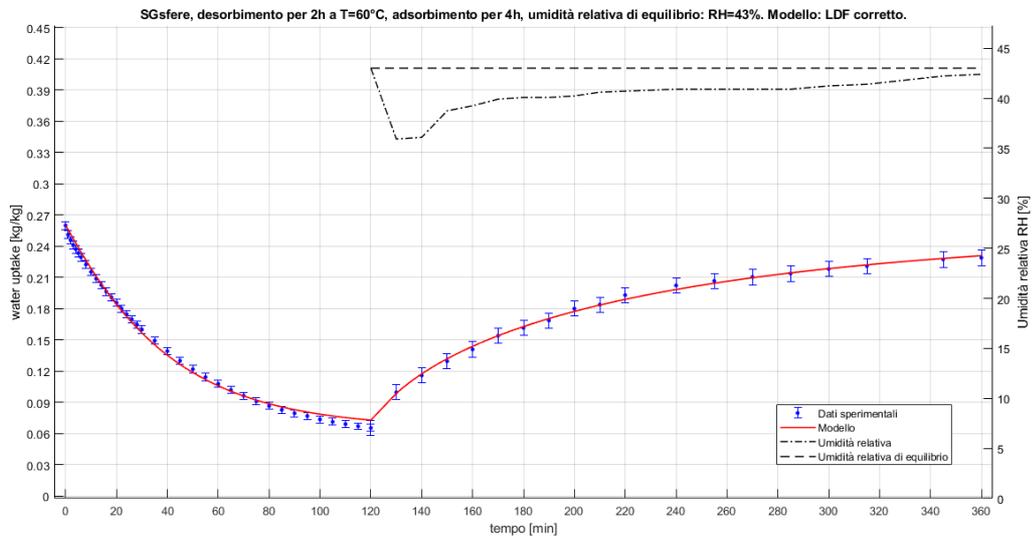
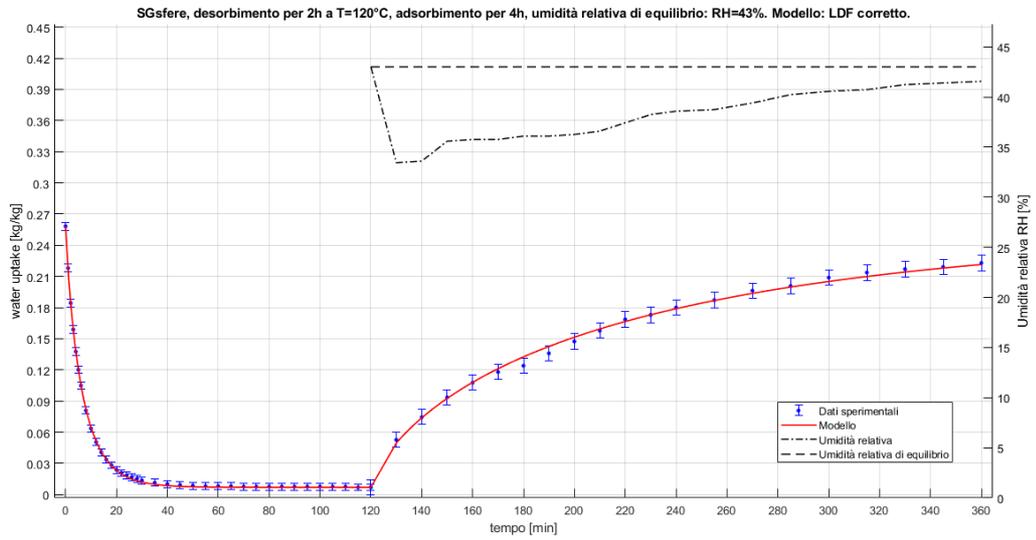
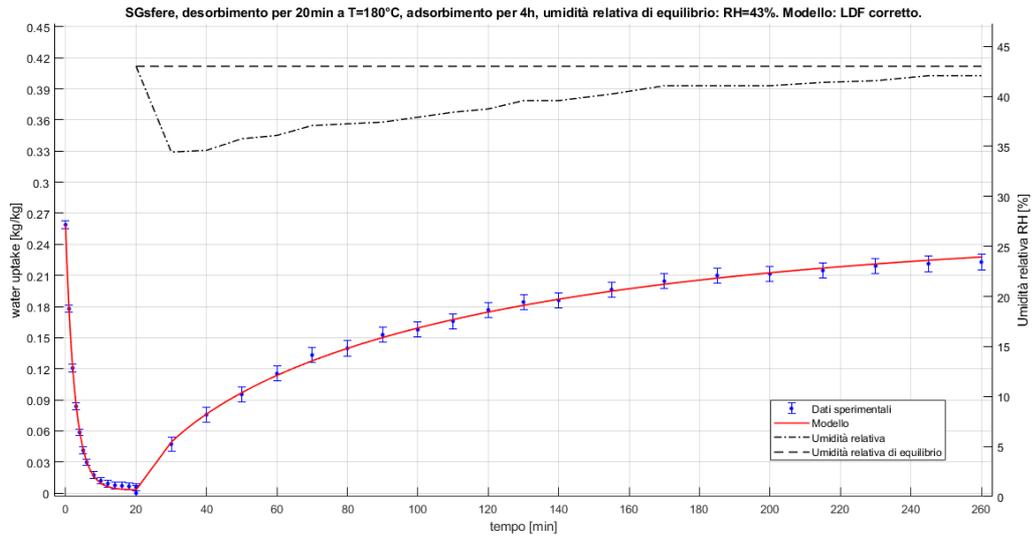


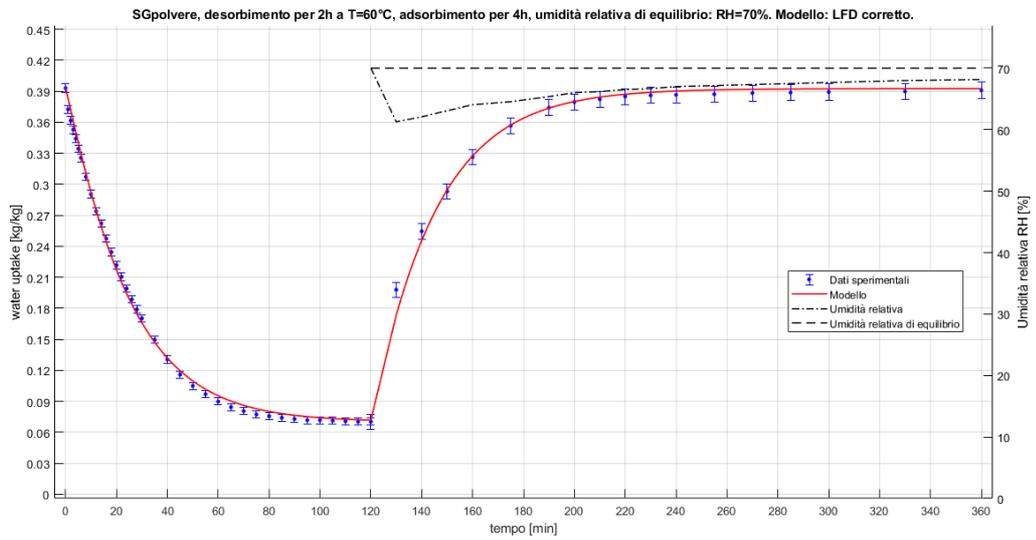
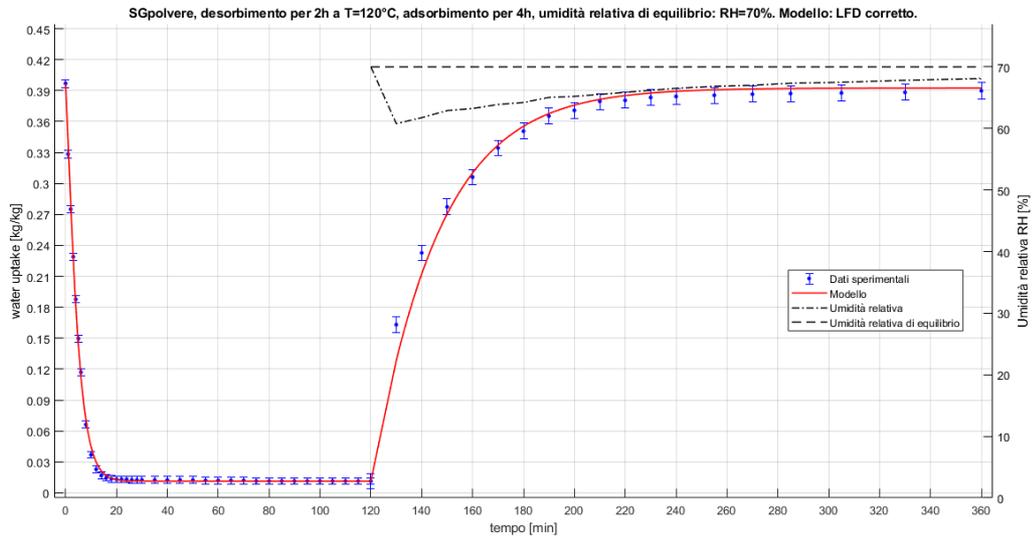
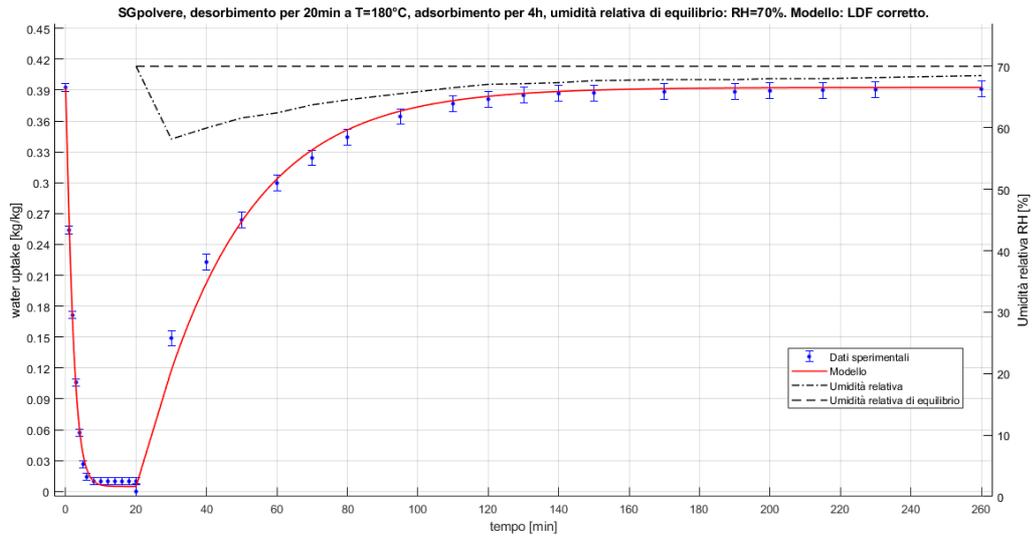
## A.5. Curve desorbimento e adsorbimento + umidità relativa dei materiali

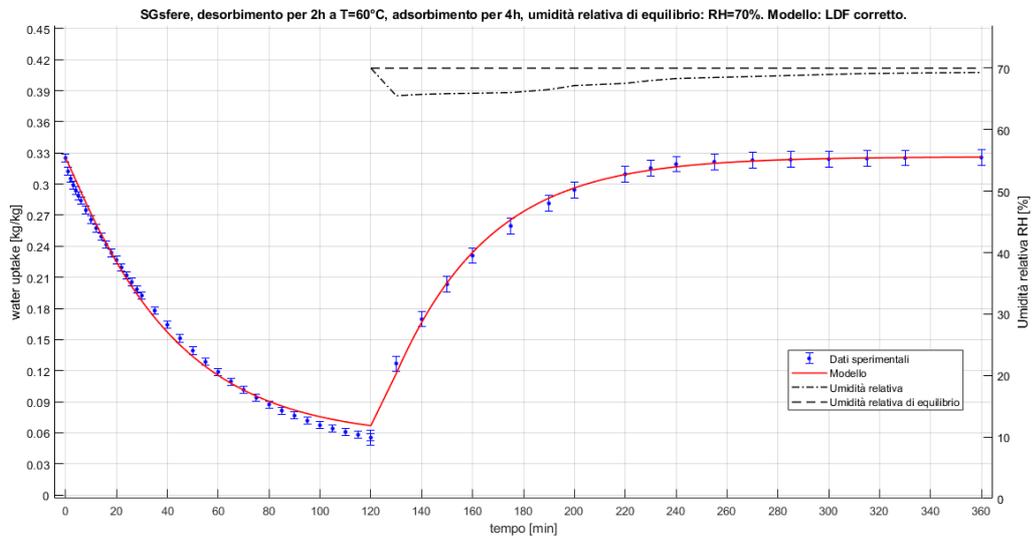
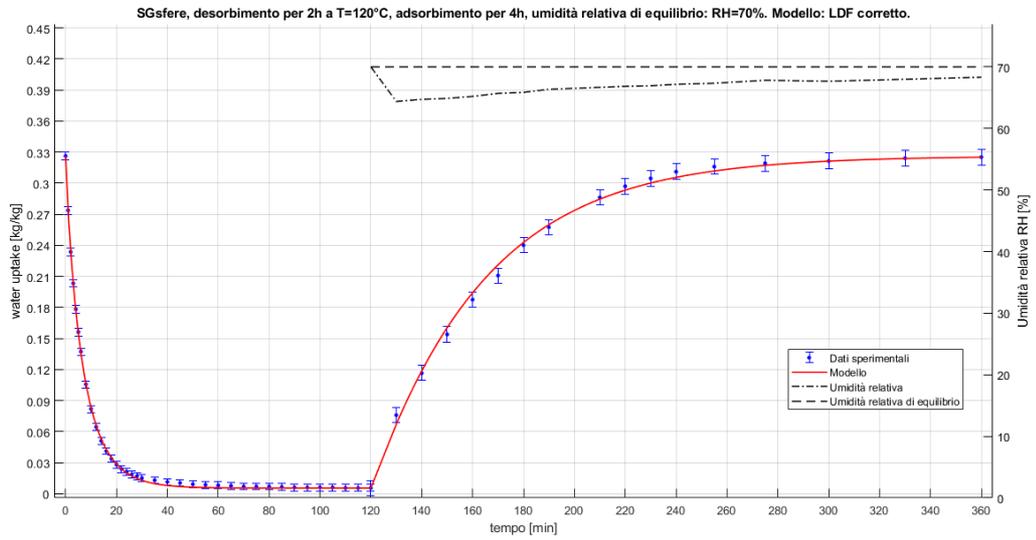
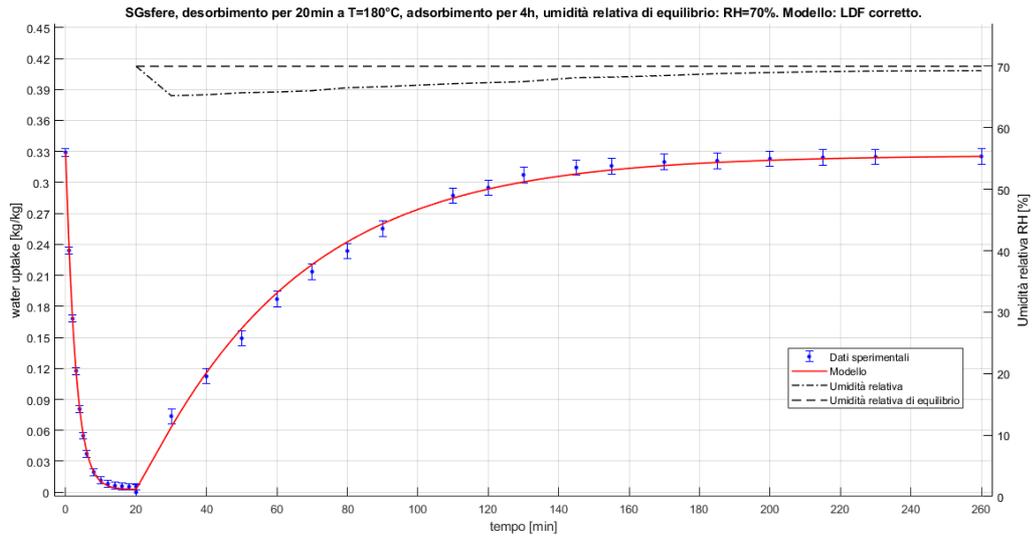


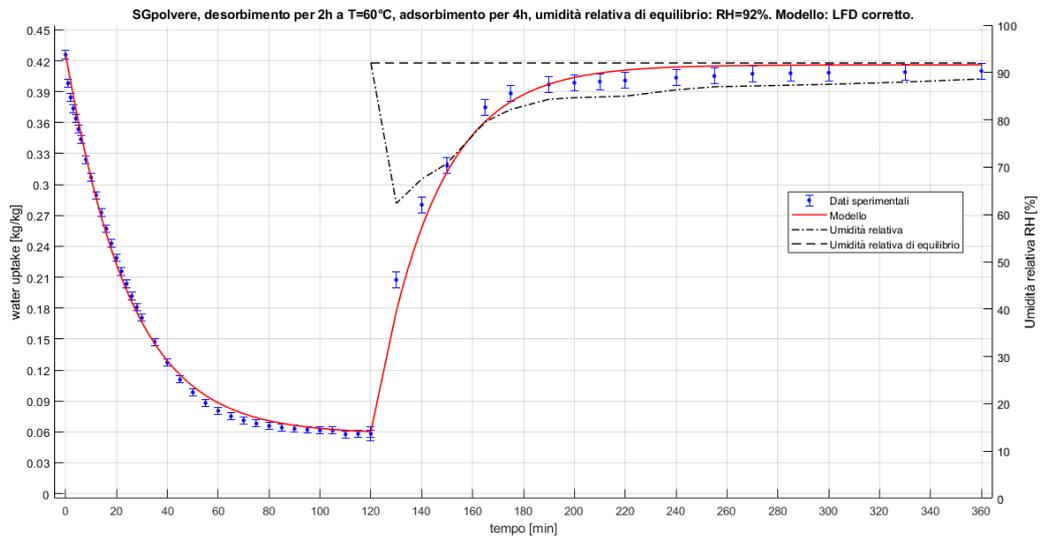
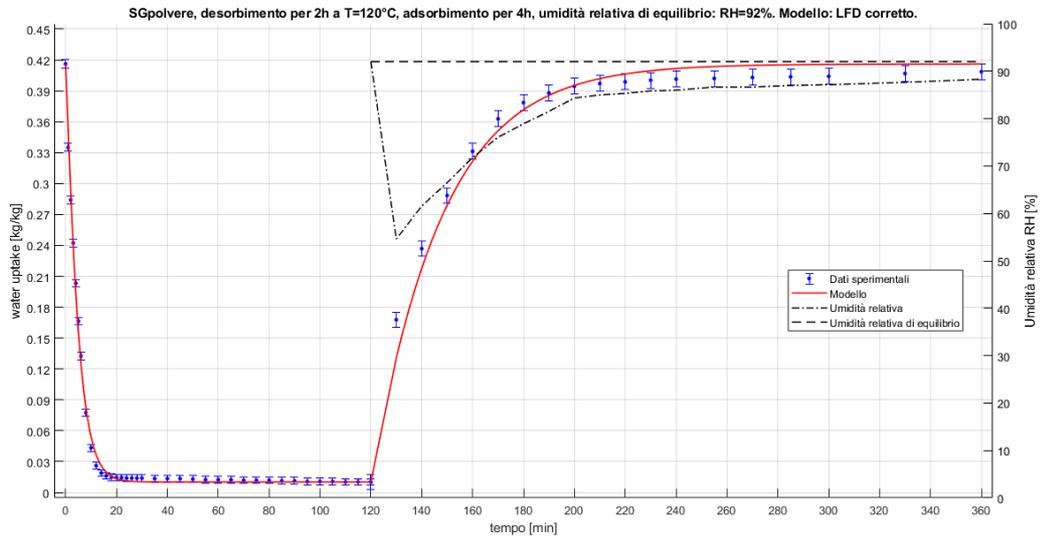
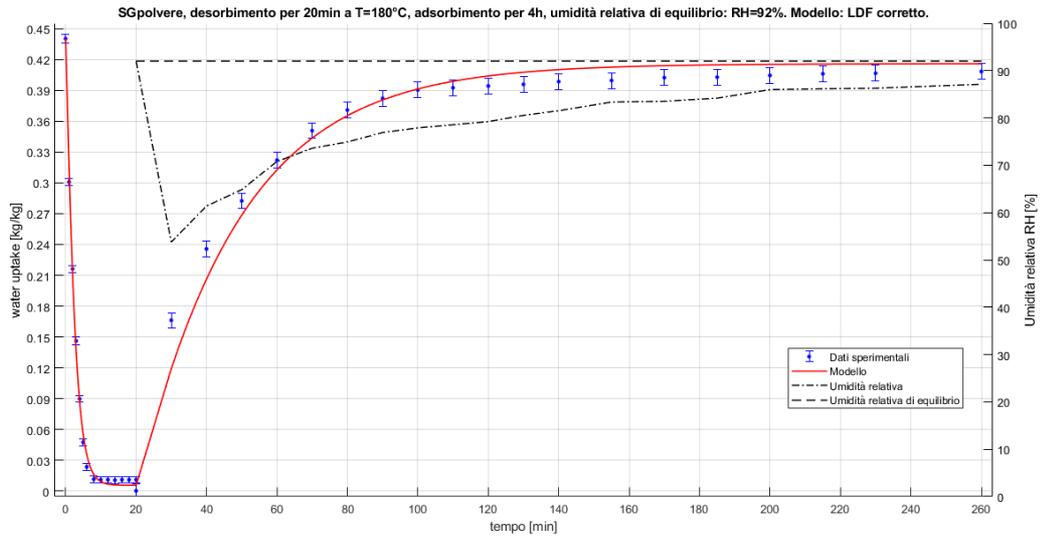


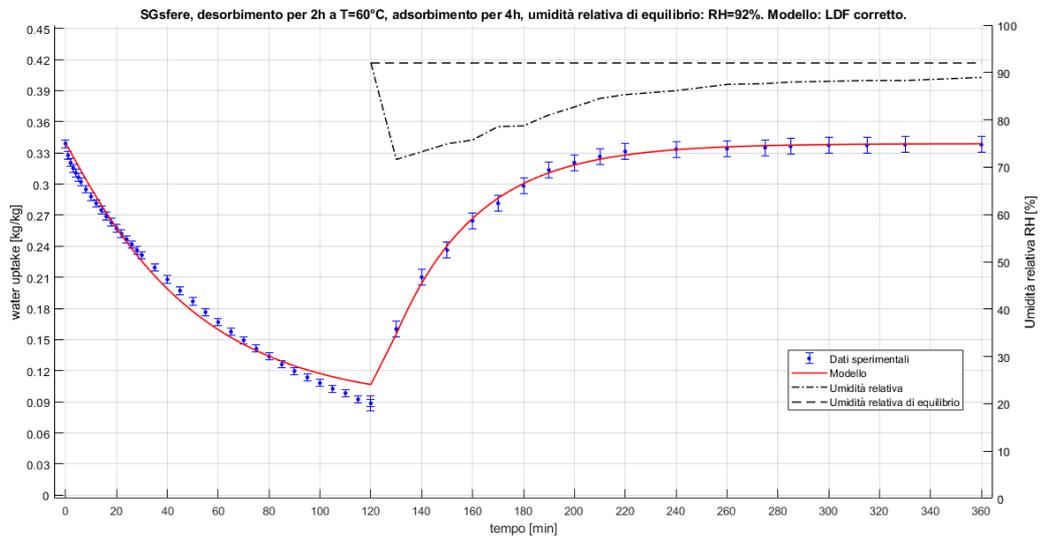
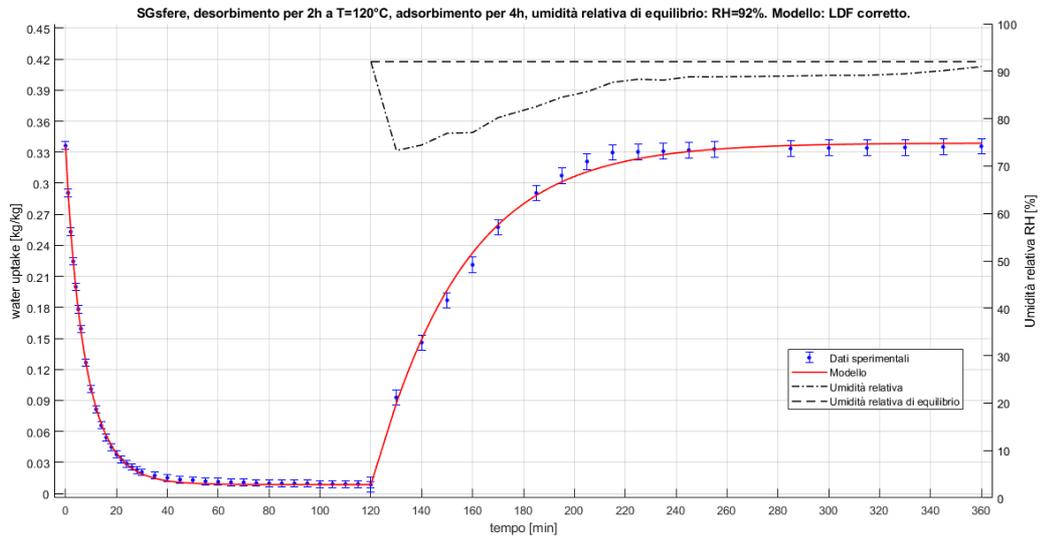
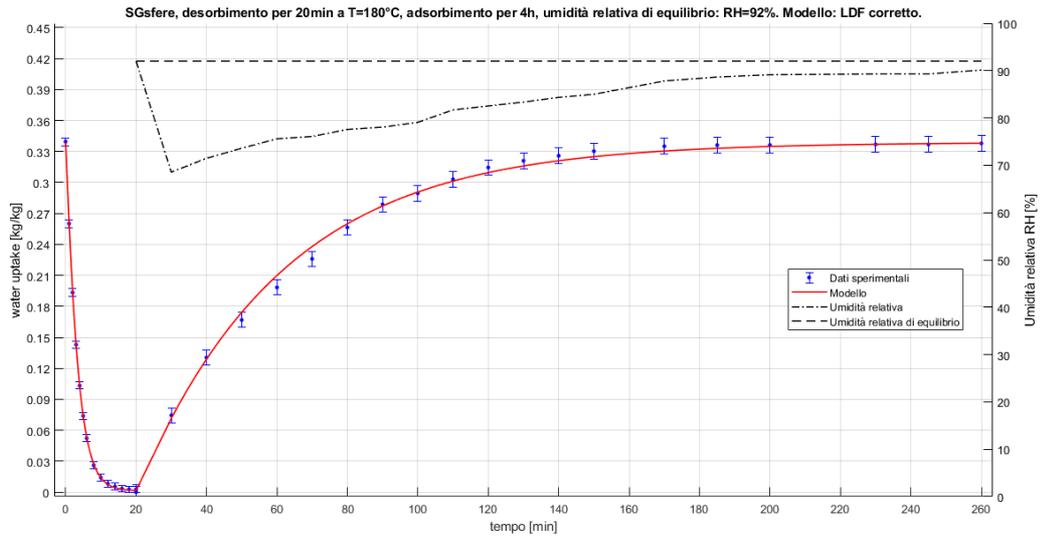












## A.6. Script MATLAB, simulazione curve di adsorbimento e desorbimento

### DATI

```

clear
load('S.mat');
load('Sc.mat');

%parametri fissi
F0 = 15; %fattore geometrico %[-]
Ru = 8.314; %costante universale %[J/(mol*K)]
Rp = [20/2*10^-6, (2.5+4)/2/2*10^-3, 20/2*10^-6]; %raggio medio polvere,
raggio medio sfere %[m]
Ea = 4.2*10^4; %Energia di attivazione %[J/mol]
m =
[mean(cell2mat({S(1:3).m,S(7:9).m,S(13:15).m,S(19:21).m})),mean(cell2mat({S(4:
6).m,S(10:12).m,S(16:18).m,S(22:24).m})),...

mean(cell2mat({Sc(1:4).m})),mean(cell2mat({S(25:31).m,S(39:45).m,S(53:59).m,S(
67:73).m})),...

mean(cell2mat({S(32:38).m,S(46:52).m,S(60:66).m,S(74:80).m})),mean(cell2mat({S
c(5:8).m}))];%fattore correttivo LDF model %[-]
mat = ["SGpolvere", "SGsfere", "Coating SG"];

```

### INPUT DA TASTIERA

```

prompt = 'Indicare tipologia di materiale. Inserire "1" per Silica Gel in
polvere, "2" per Silica Gel in sfere, "3" per Coating di Silica Gel: ';
materiale = input(prompt);
prompt = 'Inserire temperatura dell''ambiente iniziale, [°C]: ';
T_amb = input(prompt);
prompt = 'Inserire umidità relativa dell''ambiente iniziale, [%]: ';
RH_amb = input(prompt);
prompt = 'Inserire water uptake iniziale in desorbimento, [kg/kg]: ';
w_in_d = input(prompt);
prompt = 'Inserire temperatura di desorbimento, [°C]: ';
T_d = input(prompt);
prompt = 'Inserire tempo di desorbimento (max 120 min), [min]: ';
t_d = input(prompt);
prompt = 'Inserire temperatura dell''ambiente di adsorbimento, [°C]: ';
T_a = input(prompt);
prompt = 'Inserire umidità relativa dell''ambiente di adsorbimento, [%]: ';
RH_a = input(prompt);
prompt = 'Inserire tempo di adsorbimento (max 240 min), [min]: ';
t_a = input(prompt);

```

## TRASFORMAZIONI PSICROMETRICHE

```
p_sat = @(t_sat) (6.108*10^(7.5*t_sat/(237.7+t_sat)))/1000; %[bar]
p_atm = 1.01325; %[bar]
tit = @(phi,p_sat) 0.622*phi/100*p_sat/(p_atm-phi/100*p_sat);
phi = @(tit,p_sat) (tit*p_atm/(0.622*p_sat+tit*p_sat))*100;

p_sat_amb = p_sat(T_amb);
tit_amb = tit(RH_amb,p_sat_amb);
p_sat_d = p_sat(T_d);
RH_d = phi(tit_amb,p_sat_d);
```

## MODELLO VALUTAZIONE Ds (DIFFUSIVITÀ)

```
Ds =
[cell2mat({S(25:31).Ds,S(39:45).Ds,S(53:59).Ds,S(67:73).Ds}),cell2mat({S(1:3).
Ds,S(7:9).Ds,S(13:15).Ds,S(19:21).Ds})];

cell2mat({S(32:38).Ds,S(46:52).Ds,S(60:66).Ds,S(74:80).Ds}),cell2mat({S(4:6).D
s,S(10:12).Ds,S(16:18).Ds,S(22:24).Ds})];
Ds_c = cell2mat({Sc(1:8).Ds});
T =
[cell2mat({S(25:31).T,S(39:45).T,S(53:59).T,S(67:73).T}),cell2mat({S(1:3).T,S(
7:9).T,S(13:15).T,S(19:21).T})];

cell2mat({S(32:38).T,S(46:52).T,S(60:66).T,S(74:80).T}),cell2mat({S(4:6).T,S(1
0:12).T,S(16:18).T,S(22:24).T})];
T_c = cell2mat({Sc(1:8).T});

% Modello: equazione di Arrhenius con coeff. correttivo n

Ds0 = [2.4*10^-9, 2.4*10^-5, 2.4*10^-8]; %valore primo tentativo %[m^2/s]
n = 0.6; %coeff. correttivo %valore primo tentativo %[-]

if materiale~=3
    x = fliplr(T(materiale,:));
    y = fliplr(Ds(materiale,:));
else
    x = T_c;
    y = Ds_c;
end

fDs = @(x,a) a(1).*(exp(-Ea./(Ru.*(x+273))))).^a(2);

% Vettore di primo tentativo parametri incogniti funzione interpolante
a0Ds = [Ds0(materiale),n];
```

```

% INTERPOLAZIONE

tol = 1e-10; % Tolleranza richiesta nella ricerca
err_min_sqDs = @(a) sum((y-fDs(x,a)).^2); % Funzione
errore
options = optimset('TolX', tol, 'TolFun', tol, 'MaxFunEvals', 10000);

[a_soluzioneDs, erroreDs, flagDs] = fminsearch(err_min_sqDs, a0Ds, options);
% Solve

if(flagDs < 1) % La ricerca ha avuto successo?
    error('Riprovare cambiando il vettore di primo tentativo a0.');
```

```

else
    Ds_a = fDs(T_a,a_soluzioneDs);
    Ds_d = fDs(T_d,a_soluzioneDs);
end

```

## ISOTERMA

```

%isoterma (polvere, sfere, coating)
S1 = [0.813425257844904, 0.689343438851613, 0.120635101799032];
S2 = [0.245665644552503, 0.208191224197037, 0.0364334642344813];
S3 = [0.00124121681269033, 0.00105187865482231, 0.000184078764593905];
S4 = [-0.0226671635874106, -0.0192094606672972, -0.00336165561677700];
S5 = [0.0158143900616644, 0.0134020254759868, 0.00234535445829768];
S6 = [-1.72793719902988e-05, -1.46435355849989e-05, -2.56261872737482e-06];
S7 = [0.000109967633926094, 9.31929101068590e-05, 1.63087592687003e-05];
S8 = [0.0255051980247279, 0.0216145745972270, 0.00378255055451472];
S9 = [5.51754701310233e-08, 4.67588729923926e-08, 8.18280277366872e-09];
S10 = [-0.557465562187852, -0.472428442532079, -0.0826749774431137];

W = @(temp,rh)
S1(materiale).*(rh/100)+S2(materiale).*(rh/100).^2+S3(materiale).*temp+S4(mate
riale).*(rh/100).*temp+S5(materiale).*temp.*(rh/100).^2+S6(materiale).*temp.^2
+S7(materiale).*temp.^2.*(rh/100)+S8(materiale).*1+S9(materiale).*temp.^3+S10(
materiale).*(rh/100).^3;

```

## DESORBIMENTO

```

% MODELLO LDF corretto
W_d = W(T_d,RH_d); %valutazione W all'equilibrio (in desorbimento) da
funzione isoterma
xd = linspace(0,t_d,1000);
wd = w_in_d+(1-exp(-
F0.*(Ds_d.*xd*60./(Rp(materiale)^2)).^m(3+materiale))).*(W_d-w_in_d); %LDF
model corretto

```

## ADSORBIMENTO

```
% MODELLO LDF corretto
W_a = W(T_a,RH_a); %valutazione W all'equilibrio (in adsorbimento) da
funzione isoterma
w_in_a = wd(end);
xa = linspace(0,t_a,1000);
wa = w_in_a+(1-exp(-F0*(Ds_a.*xa*60/(Rp(materiale)^2)).^m(materiale)))*(W_a-
w_in_a); %LDF model corretto
```

## DESORBIMENTO + ADSORBIMENTO

```
t = [xd,(xa+t_d)];
w = [wd, wa];

figure
grid
hold on
plot(t, w, 'b-', 'linewidth', 1.2);
xlabel('tempo [min]');
ylabel('water uptake [kg/kg]');
dx = abs(t(end)-t(1))/80;
dy = abs(max(w)-min(w))/80;
axis([min(min(w)-dx,0-dx), t(end)+dx, 0-dy, max(w)+dy]);
title({strcat("Simulazione con modello LDF corretto. Materiale:
",string(mat(materiale)),". Desorbimento a T = ",string(T_d)," °C per
",string(t_d)," min; adsorbimento in ambiente a T = ",string(T_a)," °C e RH =
",string(RH_a)," % per ",string(t_a)," min. ")});
legend('Modello LDF corretto','Location','best');
hold off
```

## A.7. Safety data sheets dei materiali utilizzati nel coating

### POLYMETHYLHYDROSILOXANE, TRIMETHYLSILYL TERMINATED (RJ 202)

HMS-991 - POLYMETHYLHYDROSILOXANE, TRIMETHYLSILYL TERMINATED



**POLYMETHYLHYDROSILOXANE, TRIMETHYLSILYL TERMINATED**  
 Safety Data Sheet HMS-991  
 Date of issue: 21/03/2014      Revision date: 07/09/2016      Version: 2.0

#### SECTION 1: Identification of the substance/mixture and of the company/undertaking

##### 1.1. Product identifier

Product form : Substance  
 Physical state : Liquid  
 Substance name : POLYMETHYLHYDROSILOXANE, TRIMETHYLSILYL TERMINATED  
 Product code : HMS-991  
 Type of product : Polymer  
 Synonyms : POLY(METHYLHYDROSILOXANE)  
 METHYL HYDROGEN SILOXANE  
 POLYSILOXANES, METHYL HYDROGEN  
 SILOXANES AND SILICONES, METHYL HYDROGEN  
 Chemical family : ORGANOSILOXANE

##### 1.2. Relevant identified uses of the substance or mixture and uses advised against

###### 1.2.1. Relevant identified uses

Use of the substance/mixture : Chemical intermediate

###### 1.2.2. Uses advised against

No additional information available

##### 1.3. Details of the supplier of the safety data sheet

**GELEST, INC.**  
 11 East Steel Road  
 Morrisville, PA 19067  
**USA**  
 T 215-547-1015 - F 215-547-2484 - (M-F): 8:00 AM - 5:30 PM EST  
[info@gelest.com](mailto:info@gelest.com) - [www.gelest.com](http://www.gelest.com)

**GELEST INC.**  
 Fritz-Klatte-Strasse 8  
 65933 Frankfurt  
**Germany**  
 T +49 (0) 69 3535106-500 - F +49 (0) 69 3535106-501 - (M-F): 8:00 AM - 4:00 PM  
[info@gelestde.com](mailto:info@gelestde.com) - [www.gelestde.com](http://www.gelestde.com)

##### 1.4. Emergency telephone number

Emergency number : CHEMTREC: 1-800-424-9300 (USA); +1 703-527-3887 (International)

#### SECTION 2: Hazards identification

##### 2.1. Classification of the substance or mixture

Classification according to Regulation (EC) No. 1272/2008 [CLP]  
 Not classified

##### Adverse physicochemical, human health and environmental effects

No additional information available

##### 2.2. Label elements

###### Labelling according to Regulation (EC) No. 1272/2008 [CLP]

EUH-statements : EUH210 - Safety data sheet available on request.

##### 2.3. Other hazards

No additional information available

#### SECTION 3: Composition/information on ingredients

##### 3.1. Substances

Substance type : Mono-constituent  
 Name : POLYMETHYLHYDROSILOXANE, TRIMETHYLSILYL TERMINATED

Print date: 06/09/2018

EN (English)

SDS ID: HMS-991

1/7

# POLYMETHYLHYDROSILOXANE, TRIMETHYLSILYL TERMINATED

## Safety Data Sheet

CAS-No. : 63148-57-2

Name	Product identifier	%	Classification according to Regulation (EC) No. 1272/2008 [CLP]
Poly(methylhydrosiloxane)	(CAS-No.) 63148-57-2	98 - 100	Not classified

Full text of H-statements: see section 16

**3.2. Mixtures**

Not applicable

**SECTION 4: First aid measures****4.1. Description of first aid measures**

First-aid measures general	: Remove contaminated clothing and shoes. If you feel unwell, seek medical advice (show the label where possible). If possible show this sheet; if not available show packaging or label.
First-aid measures after inhalation	: Remove person to fresh air and keep comfortable for breathing. If you feel unwell, seek medical advice.
First-aid measures after skin contact	: Wash with plenty of water/.... Get medical advice/attention.
First-aid measures after eye contact	: Immediately flush eyes thoroughly with water for at least 15 minutes. Remove contact lenses, if present and easy to do. Continue rinsing. Get medical advice/attention.
First-aid measures after ingestion	: Never give anything by mouth to an unconscious person. Get medical advice/attention.

**4.2. Most important symptoms and effects, both acute and delayed**

Symptoms/effects after inhalation	: No significant signs or symptoms indicative of any adverse health hazard are expected to occur as a result of inhalation exposure.
Symptoms/effects after skin contact	: No significant signs or symptoms indicative of any adverse health hazard are expected to occur as a result of skin exposure.
Symptoms/effects after eye contact	: May cause slight irritation.
Symptoms/effects after ingestion	: No significant signs or symptoms indicative of any adverse health hazard are expected to occur as a result of ingestion.

**4.3. Indication of any immediate medical attention and special treatment needed**

No additional information available

**SECTION 5: Firefighting measures****5.1. Extinguishing media**

Suitable extinguishing media	: Water spray. Water fog. Foam. Carbon dioxide. Dry chemical.
Unsuitable extinguishing media	: None known.

**5.2. Special hazards arising from the substance or mixture**

Fire hazard	: Irritating fumes and organic acid vapors may develop when material is exposed to elevated temperatures or open flame.
-------------	---

**5.3. Advice for firefighters**

Firefighting instructions	: Exercise caution when fighting any chemical fire. Use water spray or fog for cooling exposed containers.
Protection during firefighting	: Do not enter fire area without proper protective equipment, including respiratory protection. Avoid all eye and skin contact and do not breathe vapour and mist.

**SECTION 6: Accidental release measures****6.1. Personal precautions, protective equipment and emergency procedures****6.1.1. For non-emergency personnel**

Protective equipment	: Wear protective equipment as described in Section 8.
Emergency procedures	: Evacuate unnecessary personnel.

**6.1.2. For emergency responders**

Protective equipment	: Do not attempt to take action without suitable protective equipment. Equip cleanup crew with proper protection. For further information refer to section 8: "Exposure controls/personal protection".
----------------------	--

**6.2. Environmental precautions**

Prevent entry to sewers and public waters.

**6.3. Methods and material for containment and cleaning up**

For containment	: Contain any spills with dikes or absorbents to prevent migration and entry into sewers or streams.
-----------------	--

Print date: 06/09/2018

EN (English)

SDS ID: HMS-991

2/7

## POLYMETHYLHYDROSILOXANE, TRIMETHYLSILYL TERMINATED

### Safety Data Sheet

Methods for cleaning up : Clean up any spills as soon as possible, using an absorbent material to collect it.

#### 6.4. Reference to other sections

See Heading 8. Exposure controls and personal protection.

### SECTION 7: Handling and storage

#### 7.1. Precautions for safe handling

Precautions for safe handling : Use personal protective equipment as required. Spillage of this material may create a slippery condition for foot or vehicle traffic.

Hygiene measures : Wash contaminated clothing before reuse. Wash hands and other exposed areas with mild soap and water before eating, drinking or smoking and when leaving work.

#### 7.2. Conditions for safe storage, including any incompatibilities

Storage conditions : Keep container tightly closed. Possible pressure build-up. Vent carefully with appropriate grounding. Self-venting bungs should be provided for long term drum storage.

Incompatible materials : Alkalis. Metal salts. Oxidizing agent. Precious metals.

#### 7.3. Specific end use(s)

No additional information available

### SECTION 8: Exposure controls/personal protection

#### 8.1. Control parameters

No additional information available

#### 8.2. Exposure controls

##### Appropriate engineering controls:

Provide local exhaust or general room ventilation.

##### Personal protective equipment:

Avoid all unnecessary exposure. Emergency eye wash fountains and safety showers should be available in the immediate vicinity of any potential exposure.

##### Hand protection:

Wear protective gloves.

##### Eye protection:

Safety glasses

##### Skin and body protection:

Wear suitable protective clothing

##### Respiratory protection:

Not required for normal conditions of use

### SECTION 9: Physical and chemical properties

#### 9.1. Information on basic physical and chemical properties

Physical state	: Liquid
Appearance	: Clear liquid.
Molecular mass	: 1400 - 1800 g/mol
Colour	: No data available
Odour	: No data available
Odour threshold	: No data available
Refractive index	: 1.395
pH	: No data available
Relative evaporation rate (butylacetate=1)	: No data available
Melting point	: < -60 °C
Freezing point	: No data available
Boiling point	: > 205 °C
Flash point	: 121 °C
Auto-ignition temperature	: No data available
Decomposition temperature	: No data available
Flammability (solid, gas)	: No data available
Vapour pressure	: No data available

## POLYMETHYLHYDROSILOXANE, TRIMETHYLSILYL TERMINATED

### Safety Data Sheet

Relative vapour density at 20 °C	: No data available
Relative density	: 0.98
Solubility	: Insoluble in water.
Log Pow	: No data available
Log Kow	: No data available
Viscosity, kinematic	: 15 - 25 cSt
Viscosity, dynamic	: No data available
Explosive properties	: No data available
Oxidising properties	: No data available
Explosive limits	: No data available

#### 9.2. Other information

No additional information available

### SECTION 10: Stability and reactivity

#### 10.1. Reactivity

No additional information available

#### 10.2. Chemical stability

Stable in sealed containers stored under a dry inert atmosphere.

#### 10.3. Possibility of hazardous reactions

The product can generate small amounts of hydrogen when exposed to alkalis and protic materials such as water and alcohol in combination with metal salts such as aluminum chloride or precious metals such as platinum.

#### 10.4. Conditions to avoid

No additional information available

#### 10.5. Incompatible materials

Alkalis. Metal salts. Oxidizing agent. Precious metals.

#### 10.6. Hazardous decomposition products

Formaldehyde. Hydrogen. Organic acid vapors. Silicon dioxide.

### SECTION 11: Toxicological information

#### 11.1. Information on toxicological effects

Acute toxicity	: Not classified
Skin corrosion/irritation	: Not classified
Serious eye damage/irritation	: Not classified
Respiratory or skin sensitisation	: Not classified
Germ cell mutagenicity	: Not classified
Carcinogenicity	: Not classified
	None of the components in this product at concentrations >0.1% are listed by IARC, NTP, OSHA or ACGIH as a carcinogen.
Reproductive toxicity	: Not classified
STOT-single exposure	: Not classified
STOT-repeated exposure	: Not classified
Aspiration hazard	: Not classified
Symptoms/effects after inhalation	: No significant signs or symptoms indicative of any adverse health hazard are expected to occur as a result of inhalation exposure.
Symptoms/effects after skin contact	: No significant signs or symptoms indicative of any adverse health hazard are expected to occur as a result of skin exposure.
Symptoms/effects after eye contact	: May cause slight irritation.
Symptoms/effects after ingestion	: No significant signs or symptoms indicative of any adverse health hazard are expected to occur as a result of ingestion.

### SECTION 12: Ecological information

#### 12.1. Toxicity

Acute aquatic toxicity	: Not classified
Chronic aquatic toxicity	: Not classified

#### 12.2. Persistence and degradability

No additional information available

## POLYMETHYLHYDROSILOXANE, TRIMETHYLSILYL TERMINATED

### Safety Data Sheet

#### 12.3. Bioaccumulative potential

No additional information available

#### 12.4. Mobility in soil

No additional information available

#### 12.5. Results of PBT and vPvB assessment

No additional information available

#### 12.6. Other adverse effects

No additional information available

### SECTION 13: Disposal considerations

#### 13.1. Waste treatment methods

Sewage disposal recommendations	: Do not dispose of waste into sewer.
Product/Packaging disposal recommendations	: Dispose in a safe manner in accordance with local/national regulations.
Ecology - waste materials	: Avoid release to the environment.

### SECTION 14: Transport information

#### 14.1. UN number

In accordance with ADR / RID / IMDG / IATA / ADN

#### 14.1. UN number

UN-No. (ADR)	: Not applicable
UN-No. (IMDG)	: Not applicable
UN-No. (IATA)	: Not applicable
UN-No. (ADN)	: Not applicable
UN-No. (RID)	: Not applicable

#### 14.2. UN proper shipping name

Proper Shipping Name (ADR)	: Not applicable
Proper Shipping Name (IMDG)	: Not applicable
Proper Shipping Name (IATA)	: Not applicable
Proper Shipping Name (ADN)	: Not applicable
Proper Shipping Name (RID)	: Not applicable

#### 14.3. Transport hazard class(es)

##### ADR

Transport hazard class(es) (ADR) : Not applicable

##### IMDG

Transport hazard class(es) (IMDG) : Not applicable

##### IATA

Transport hazard class(es) (IATA) : Not applicable

##### ADN

Transport hazard class(es) (ADN) : Not applicable

##### RID

Transport hazard class(es) (RID) : Not applicable

#### 14.4. Packing group

Packing group (ADR)	: Not applicable
Packing group (IMDG)	: Not applicable
Packing group (IATA)	: Not applicable
Packing group (ADN)	: Not applicable
Packing group (RID)	: Not applicable

#### 14.5. Environmental hazards

Dangerous for the environment	: No
Marine pollutant	: No
Other information	: No supplementary information available

## POLYMETHYLHYDROSILOXANE, TRIMETHYLSILYL TERMINATED

### Safety Data Sheet

#### 14.6. Special precautions for user

##### - Overland transport

No data available

##### - Transport by sea

No data available

##### - Air transport

No data available

##### - Inland waterway transport

No data available

##### - Rail transport

No data available

#### 14.7. Transport in bulk according to Annex II of Marpol and the IBC Code

Not applicable

### SECTION 15: Regulatory information

#### 15.1. Safety, health and environmental regulations/legislation specific for the substance or mixture

##### 15.1.1. EU-Regulations

No REACH Annex XVII restrictions

POLYMETHYLHYDROSILOXANE, TRIMETHYLSILYL TERMINATED is not on the REACH Candidate List

POLYMETHYLHYDROSILOXANE, TRIMETHYLSILYL TERMINATED is not on the REACH Annex XIV List

##### 15.1.2. National regulations

###### Germany

12th Ordinance Implementing the Federal Immission Control Act - 12.BImSchV : Is not subject of the 12. BImSchV (Hazardous Incident Ordinance)

###### Netherlands

SZW-lijst van kankerverwekkende stoffen : The substance is not listed

SZW-lijst van mutagene stoffen : The substance is not listed

NIET-limitatieve lijst van voor de voortplanting giftige stoffen – Borstvoeding : The substance is not listed

NIET-limitatieve lijst van voor de voortplanting giftige stoffen – Vruchtbaarheid : The substance is not listed

NIET-limitatieve lijst van voor de voortplanting giftige stoffen – Ontwikkeling : The substance is not listed

#### 15.2. Chemical safety assessment

No additional information available

### SECTION 16: Other information

Indication of changes:

Applied changes to sections 4, 7.1-7.2 and 8.1.

Abbreviations and acronyms:

Abbreviations: ND: Not Determined, No Data; NA: Not Applicable; LD: Lethal Dose; LC: Lethal Concentration; ATE: Acute Toxicity Estimates; H: hour; °: °C unless otherwise stated; mm: millimeters Hg, torr; PEL: permissible exposure level; TWA: time weighted average; TLV: threshold limit value; TG: Test Guideline; NIOSH: National Institute for Occupational Safety and Health; IARC: International Agency for Research on Cancer; NTP: National Toxicology Program; HMIS: Hazardous Material Information System; CAS No.: Chemical Abstract Service Registration Number, EC No.: European Commission Registration Number; EC Index No.: European Commission Index Number; OECD: The Organisation for Economic Co-operation and Development; GHS: The Globally Harmonized System of Classification and Labelling; APF: Assigned Protection Factor
--

Other information : Prepared by safety and environmental affairs.

Full text of H- and EUH-statements:

EUH210	Safety data sheet available on request.
--------	---

## SILANOL TERMINATED POLYDIMETHYLSILOXANE (RJ 107)

DMS-S27 - SILANOL TERMINATED POLYDIMETHYLSILOXANE

**SILANOL TERMINATED POLYDIMETHYLSILOXANE**

Safety Data Sheet DMS-S27

Date of issue: 27/10/2014

Revision date: 23/10/2015

Version: 2.0

**SECTION 1: Identification of the substance/mixture and of the company/undertaking****1.1. Product identifier**

Product form : Substance  
 Physical state : Liquid  
 Substance name : SILANOL TERMINATED POLYDIMETHYLSILOXANE  
 Product code : DMS-S27  
 Synonyms : HYDROXY TERMINATED POLYDIMETHYLSILOXANE  
 Chemical family : ORGANOSILOXANE

**1.2. Relevant identified uses of the substance or mixture and uses advised against****1.2.1. Relevant identified uses**

Use of the substance/mixture : Chemical intermediate

**1.2.2. Uses advised against**

No additional information available

**1.3. Details of the supplier of the safety data sheet****GELEST, INC.**11 East Steel Road  
Morrisville, PA 19067**USA**

T 215-547-1015 - F 215-547-2484 - (M-F): 8:00 AM - 5:30 PM EST

[info@gelest.com](mailto:info@gelest.com) - [www.gelest.com](http://www.gelest.com)**GELEST INC.**

Fritz-Klatte-Strasse 8

65933 Frankfurt

**Germany**

T +49 (0) 69 3535106-500 - F +49 (0) 69 3535106-501 - (M-F): 8:00 AM - 4:00 PM

[info@gelestde.com](mailto:info@gelestde.com) - [www.gelestde.com](http://www.gelestde.com)**1.4. Emergency telephone number**

Emergency number : CHEMTREC: 1-800-424-9300 (USA); +1 703-527-3887 (International)

**SECTION 2: Hazards identification****2.1. Classification of the substance or mixture**

Classification according to Regulation (EC) No. 1272/2008 [CLP]

Not classified

**Adverse physicochemical, human health and environmental effects**

No additional information available

**2.2. Label elements**

Labelling according to Regulation (EC) No. 1272/2008 [CLP]

EUH-statements : EUH210 - Safety data sheet available on request.

**2.3. Other hazards**Contains PBT/VPvB substances  $\geq$  0.1% assessed in accordance with REACH Annex XIII**SECTION 3: Composition/information on ingredients****3.1. Substances**

Substance type : Polymer  
 Name : SILANOL TERMINATED POLYDIMETHYLSILOXANE  
 CAS-No. : 70131-67-8

## SILANOL TERMINATED POLYDIMETHYLSILOXANE

### Safety Data Sheet

Name	Product identifier	%	Classification according to Regulation (EC) No. 1272/2008 [CLP]
Silanol terminated polydimethylsiloxane	(CAS-No.) 70131-67-8 (EC-No.) 615-070-3	> 95	Not classified
Octamethylcyclotetrasiloxane substance listed as REACH Candidate (Octamethylcyclotetrasiloxane (D4))	(CAS-No.) 556-67-2 (EC-No.) 209-136-7	< 3	Repr. 2, H361f Aquatic Chronic 4, H413

Full text of H-statements: see section 16

#### 3.2. Mixtures

Not applicable

### SECTION 4: First aid measures

#### 4.1. Description of first aid measures

- First-aid measures general : Remove contaminated clothing and shoes. In case of accident or if you feel unwell, seek medical advice immediately (show the label where possible). If possible show this sheet; if not available show packaging or label.
- First-aid measures after inhalation : Remove person to fresh air and keep comfortable for breathing. If you feel unwell, seek medical advice.
- First-aid measures after skin contact : Wash with plenty of water/.... Get medical advice/attention.
- First-aid measures after eye contact : Immediately flush eyes thoroughly with water for at least 15 minutes. Get medical advice/attention.
- First-aid measures after ingestion : Never give anything by mouth to an unconscious person. Get medical advice/attention.

#### 4.2. Most important symptoms and effects, both acute and delayed

- Symptoms/effects after inhalation : May be harmful if inhaled.
- Symptoms/effects after skin contact : May cause skin irritation.
- Symptoms/effects after eye contact : May cause eye irritation.
- Symptoms/effects after ingestion : No information available.

#### 4.3. Indication of any immediate medical attention and special treatment needed

No additional information available

### SECTION 5: Firefighting measures

#### 5.1. Extinguishing media

- Suitable extinguishing media : Water spray. Water fog. Foam. Carbon dioxide. Dry chemical.
- Unsuitable extinguishing media : None known.

#### 5.2. Special hazards arising from the substance or mixture

- Fire hazard : Irritating fumes and organic acid vapors may develop when material is exposed to elevated temperatures or open flame.

#### 5.3. Advice for firefighters

- Firefighting instructions : Use water spray or fog for cooling exposed containers. Exercise caution when fighting any chemical fire.
- Protection during firefighting : Do not enter fire area without proper protective equipment, including respiratory protection. Avoid all eye and skin contact and do not breathe vapour and mist.

### SECTION 6: Accidental release measures

#### 6.1. Personal precautions, protective equipment and emergency procedures

##### 6.1.1. For non-emergency personnel

- Protective equipment : Wear protective equipment as described in Section 8.
- Emergency procedures : Evacuate unnecessary personnel.

##### 6.1.2. For emergency responders

- Protective equipment : Do not attempt to take action without suitable protective equipment. Equip cleanup crew with proper protection. For further information refer to section 8: "Exposure controls/personal protection".

#### 6.2. Environmental precautions

Prevent entry to sewers and public waters. Notify authorities if liquid enters sewers or public waters.

#### 6.3. Methods and material for containment and cleaning up

- For containment : Contain any spills with dikes or absorbents to prevent migration and entry into sewers or streams.

## SILANOL TERMINATED POLYDIMETHYLSILOXANE

### Safety Data Sheet

Methods for cleaning up : Clean up any spills as soon as possible, using an absorbent material to collect it. Sweep or shovel spills into appropriate container for disposal.

#### 6.4. Reference to other sections

See Heading 8. Exposure controls and personal protection.

### SECTION 7: Handling and storage

#### 7.1. Precautions for safe handling

Precautions for safe handling : Avoid all eye and skin contact and do not breathe vapour and mist. Spillage of this material may create a slippery condition for foot or vehicle traffic. Use only in well ventilated areas.

Hygiene measures : Wash contaminated clothing before reuse. Wash hands and other exposed areas with mild soap and water before eating, drinking or smoking and when leaving work.

#### 7.2. Conditions for safe storage, including any incompatibilities

Storage conditions : Keep container tightly closed.

Incompatible materials : Oxidizing agent.

Storage area : Store in a well-ventilated place. Store away from heat.

#### 7.3. Specific end use(s)

No additional information available

### SECTION 8: Exposure controls/personal protection

#### 8.1. Control parameters

No additional information available

#### 8.2. Exposure controls

##### Appropriate engineering controls:

Provide local exhaust or general room ventilation.

##### Personal protective equipment:

Emergency eye wash fountains and safety showers should be available in the immediate vicinity of any potential exposure. Avoid all unnecessary exposure.

##### Hand protection:

Neoprene or nitrile rubber gloves

##### Eye protection:

Chemical goggles. Contact lenses should not be worn

##### Skin and body protection:

Wear suitable protective clothing

##### Respiratory protection:

Where exposure through inhalation may occur from use, respiratory protection equipment is recommended. NIOSH-certified organic vapor (black cartridge) respirator.

### SECTION 9: Physical and chemical properties

#### 9.1. Information on basic physical and chemical properties

Physical state	: Liquid
Appearance	: Clear liquid.
Molecular mass	: 18000 g/mol
Colour	: No data available
Odour	: Mild menthol-like aroma.
Odour threshold	: No data available
Refractive index	: 1.403
pH	: No data available
Relative evaporation rate (butylacetate=1)	: No data available
Melting point	: < -60 °C
Freezing point	: No data available
Boiling point	: > 205 °C
Flash point	: 205 °C
Auto-ignition temperature	: No data available
Decomposition temperature	: No data available

## SILANOL TERMINATED POLYDIMETHYLSILOXANE

### Safety Data Sheet

Flammability (solid, gas)	: No data available
Vapour pressure	: No data available
Relative vapour density at 20 °C	: No data available
Relative density	: 0.97
Solubility	: Insoluble in water.
Log Pow	: No data available
Log Kow	: No data available
Viscosity, kinematic	: 700 - 800 cSt
Viscosity, dynamic	: No data available
Explosive properties	: No data available
Oxidising properties	: No data available
Explosive limits	: No data available

#### 9.2. Other information

No additional information available

### SECTION 10: Stability and reactivity

#### 10.1. Reactivity

No additional information available

#### 10.2. Chemical stability

Stable.

#### 10.3. Possibility of hazardous reactions

No additional information available

#### 10.4. Conditions to avoid

Heat. Open flame. Sparks.

#### 10.5. Incompatible materials

Oxidizing agent.

#### 10.6. Hazardous decomposition products

Formaldehyde. Organic acid vapors. Silicon dioxide.

### SECTION 11: Toxicological information

#### 11.1. Information on toxicological effects

Acute toxicity : Not classified

#### Octamethylcyclotetrasiloxane (556-67-2)

LD50 oral rat	1540 mg/kg RTECS Number: GZ4397000
LD50 dermal rat	1770 mg/kg
LD50 dermal rabbit	794 µl/kg
LC50 inhalation rat (mg/l)	36 g/m <sup>3</sup> (Exposure time: 4 h)
ATE CLP (oral)	1540 mg/kg bodyweight
ATE CLP (dermal)	1770 mg/kg bodyweight
ATE CLP (vapours)	36 mg/l/4h
ATE CLP (dust,mist)	36 mg/l/4h

#### Silanol terminated polydimethylsiloxane (70131-67-8)

LD50 oral rat	> 15400 mg/kg
LD50 dermal rabbit	> 16 ml/kg
LC50 inhalation rat (mg/l)	> 8750 mg/m <sup>3</sup> (Exposure time: 7 h)

Skin corrosion/irritation	: Not classified
Serious eye damage/irritation	: Not classified
Respiratory or skin sensitisation	: Not classified
Germ cell mutagenicity	: Not classified
Carcinogenicity	: Not classified
Reproductive toxicity	: Not classified
STOT-single exposure	: Not classified
STOT-repeated exposure	: Not classified
Aspiration hazard	: Not classified
Symptoms/effects after inhalation	: May be harmful if inhaled.

## SILANOL TERMINATED POLYDIMETHYLSILOXANE

### Safety Data Sheet

Symptoms/effects after skin contact : May cause skin irritation.  
 Symptoms/effects after eye contact : May cause eye irritation.  
 Symptoms/effects after ingestion : No information available.

#### SECTION 12: Ecological information

##### 12.1. Toxicity

Acute aquatic toxicity : Not classified  
 Chronic aquatic toxicity : Not classified

Octamethylcyclotetrasiloxane (556-67-2)	
LC50 fish 1	> 500 mg/l (Exposure time: 96 h - Species: Brachydanio rerio)
LC50 fish 2	> 1000 mg/l (Exposure time: 96 h - Species: Lepomis macrochirus)

##### 12.2. Persistence and degradability

No additional information available

##### 12.3. Bioaccumulative potential

Octamethylcyclotetrasiloxane (556-67-2)	
BCF fish 1	12400
Log Pow	5.1

##### 12.4. Mobility in soil

No additional information available

##### 12.5. Results of PBT and vPvB assessment

Component	
Octamethylcyclotetrasiloxane (556-67-2)	This substance/mixture meets the PBT criteria of REACH regulation, annex XIII This substance/mixture meets the vPvB criteria of REACH regulation, annex XIII

##### 12.6. Other adverse effects

No additional information available

#### SECTION 13: Disposal considerations

##### 13.1. Waste treatment methods

Sewage disposal recommendations : Do not dispose of waste into sewer.  
 Product/Packaging disposal recommendations : Incinerate. Dispose in a safe manner in accordance with local/national regulations.  
 Ecology - waste materials : Avoid release to the environment.

#### SECTION 14: Transport information

##### 14.1. UN number

In accordance with ADR / RID / IMDG / IATA / ADN

##### 14.1. UN number

UN-No. (ADR) : Not applicable  
 UN-No. (IMDG) : Not applicable  
 UN-No. (IATA) : Not applicable  
 UN-No. (ADN) : Not applicable  
 UN-No. (RID) : Not applicable

##### 14.2. UN proper shipping name

Proper Shipping Name (ADR) : Not applicable  
 Proper Shipping Name (IMDG) : Not applicable  
 Proper Shipping Name (IATA) : Not applicable  
 Proper Shipping Name (ADN) : Not applicable  
 Proper Shipping Name (RID) : Not applicable

##### 14.3. Transport hazard class(es)

###### ADR

Transport hazard class(es) (ADR) : Not applicable

###### IMDG

Transport hazard class(es) (IMDG) : Not applicable

###### IATA

## SILANOL TERMINATED POLYDIMETHYLSILOXANE

### Safety Data Sheet

Transport hazard class(es) (IATA) : Not applicable

#### ADN

Transport hazard class(es) (ADN) : Not applicable

#### RID

Transport hazard class(es) (RID) : Not applicable

#### 14.4. Packing group

Packing group (ADR) : Not applicable  
 Packing group (IMDG) : Not applicable  
 Packing group (IATA) : Not applicable  
 Packing group (ADN) : Not applicable  
 Packing group (RID) : Not applicable

#### 14.5. Environmental hazards

Dangerous for the environment : No  
 Marine pollutant : No  
 Other information : No supplementary information available

#### 14.6. Special precautions for user

##### - Overland transport

No data available

##### - Transport by sea

No data available

##### - Air transport

No data available

##### - Inland waterway transport

No data available

##### - Rail transport

No data available

#### 14.7. Transport in bulk according to Annex II of Marpol and the IBC Code

Not applicable

### SECTION 15: Regulatory information

#### 15.1. Safety, health and environmental regulations/legislation specific for the substance or mixture

##### 15.1.1. EU-Regulations

No REACH Annex XVII restrictions

SILANOL TERMINATED POLYDIMETHYLSILOXANE is not on the REACH Candidate List

Contains a substance on the REACH candidate list in concentration  $\geq 0.1\%$  or with a lower specific limit: Octamethylcyclotetrasiloxane (D4) (EC 209-136-7, CAS 556-67-2)

SILANOL TERMINATED POLYDIMETHYLSILOXANE is not on the REACH Annex XIV List

##### 15.1.2. National regulations

#### Germany

Reference to AwSV : Water hazard class (WGK) 1, low hazard to water (Classification according to VwVwS, Annex 1 or 2; ID No. 543)

12th Ordinance Implementing the Federal Immission Control Act - 12.BImSchV : Is not subject of the 12. BImSchV (Hazardous Incident Ordinance)

#### Netherlands

SZW-lijst van kankerverwekkende stoffen : The substance is not listed

SZW-lijst van mutagene stoffen : The substance is not listed

NIET-limitatieve lijst van voor de voortplanting giftige stoffen – Borstvoeding : The substance is not listed

NIET-limitatieve lijst van voor de voortplanting giftige stoffen – Vruchtbaarheid : The substance is not listed

Print date: 07/09/2018

EN (English)

SDS ID: DMS-S27

6/7

## SILANOL TERMINATED POLYDIMETHYLSILOXANE

### Safety Data Sheet

NIET-limitatieve lijst van voor de voortplanting giftige stoffen – Ontwikkeling : The substance is not listed

#### 15.2. Chemical safety assessment

No additional information available

#### SECTION 16: Other information

Abbreviations and acronyms:

	Abbreviations: ND: Not Determined, No Data; NA: Not Applicable; LD: Lethal Dose; LC: Lethal Concentration; ATE: Acute Toxicity Estimates; H: hour; °: °C unless otherwise stated; mm: millimeters Hg, torr; PEL: permissible exposure level; TWA: time weighted average; TLV: threshold limit value; TG: Test Guideline; NIOSH: National Institute for Occupational Safety and Health; IARC: International Agency for Research on Cancer; NTP: National Toxicology Program; HMIS: Hazardous Material Information System; CAS No.: Chemical Abstract Service Registration Number, EC No.: European Commission Registration Number, EC Index No.: European Commission Index Number, OECD: The Organisation for Economic Co-operation and Development; GHS: The Globally Harmonized System of Classification and Labelling; APF: Assigned Protection Factor
--	--

Other information : Prepared by safety and environmental affairs.

Full text of H- and EUH-statements:

Aquatic Chronic 4	Hazardous to the aquatic environment — Chronic Hazard, Category 4
Repr. 2	Reproductive toxicity, Category 2
H361f	Suspected of damaging fertility.
H413	May cause long lasting harmful effects to aquatic life.
EUH210	Safety data sheet available on request.

SDS EU (REACH Annex II) - Custom

*The information contained in this document has been gathered from reference materials and/or Gelest, Inc. test data and is to the best knowledge and belief of Gelest, Inc. accurate and reliable. Such information is offered solely for your consideration, investigation and verification. It is not suggested or guaranteed that the hazard precautions or procedures described are the only ones which exist. Gelest, Inc. makes no warranties, express or implied, with respect to the use of such information and assumes no responsibility therefore. Information on this safety data sheet is not intended to constitute a basis for product specifications.*

© 2018 Gelest Inc. Morrisville, PA 19067

## BIS(NEODECANOATE)TIN, TECH-90 (CATALIZZATORE T9)

SNB1710 - BIS(NEODECANOATE)TIN, tech-90

**BIS(NEODECANOATE)TIN, tech-90**

Safety Data Sheet SNB1710

Date of issue: 19/08/2015

Version: 1.0

**SECTION 1: Identification of the substance/mixture and of the company/undertaking****1.1. Product identifier**

Product form	: Substance
Physical state	: Liquid
Substance name	: BIS(NEODECANOATE)TIN, tech-90
Product code	: SNB1710
Formula	: C20H38O4Sn
Synonyms	: TIN(II) NEODECANOATE; STANNOUS NEODECANOATE
Chemical family	: ORGANOTIN

**1.2. Relevant identified uses of the substance or mixture and uses advised against****1.2.1. Relevant identified uses**

Use of the substance/mixture : Chemical intermediate

**1.2.2. Uses advised against**

No additional information available

**1.3. Details of the supplier of the safety data sheet****GELEST, INC.**11 East Steel Road  
Morrisville, PA 19067**USA**

T 215-547-1015 - F 215-547-2484 - (M-F): 8:00 AM - 5:30 PM EST

[info@gelest.com](mailto:info@gelest.com) - [www.gelest.com](http://www.gelest.com)**GELEST INC.**Fritz-Klatte-Strasse 8  
65933 Frankfurt**Germany**

T +49 (0) 69 3535106-500 - F +49 (0) 69 3535106-501 - (M-F): 8:00 AM - 4:00 PM

[info@gelestde.com](mailto:info@gelestde.com) - [www.gelestde.com](http://www.gelestde.com)**1.4. Emergency telephone number**

Emergency number : CHEMTREC: 1-800-424-9300 (USA); +1 703-527-3887 (International)

**SECTION 2: Hazards identification****2.1. Classification of the substance or mixture****Classification according to Regulation (EC) No. 1272/2008 [CLP]**

Skin corrosion/irritation, Category 2 H315

Serious eye damage/eye irritation, Category 2 H319

2

Full text of H statements : see section 16

**Adverse physicochemical, human health and environmental effects**

No additional information available

**2.2. Label elements****Labelling according to Regulation (EC) No. 1272/2008 [CLP]**

Hazard pictograms (CLP) :



GHS07

Signal word (CLP) :

: Warning

Hazard statements (CLP) :

: H315 - Causes skin irritation.  
H319 - Causes serious eye irritation.

## BIS(NEODECANOATE)TIN, tech-90

### Safety Data Sheet

Precautionary statements (CLP) : P280 - Wear protective gloves/protective clothing/eye protection/face protection.  
 P264 - Wash hands thoroughly after handling.  
 P302+P352 - IF ON SKIN: Wash with plenty of soap and water.  
 P332+P313 - If skin irritation occurs: Get medical advice/attention.  
 P305+P351+P338 - IF IN EYES: Rinse cautiously with water for several minutes. Remove contact lenses, if present and easy to do. Continue rinsing.  
 P337+P313 - If eye irritation persists: Get medical advice/attention.

#### 2.3. Other hazards

No additional information available

### SECTION 3: Composition/information on ingredients

#### 3.1. Substances

Substance type : Multi-constituent  
 Name : BIS(NEODECANOATE)TIN, tech-90  
 CAS-No. : 49556-16-3  
 EC-No. : 256-370-0

Name	Product identifier	%	Classification according to Regulation (EC) No. 1272/2008 [CLP]
Tin(2+) neodecanoate	(CAS-No.) 49556-16-3 (EC-No.) 256-370-0	> 80	Skin Irrit. 2, H315 Eye Irrit. 2, H319
Neodecanoic acid	(CAS-No.) 26896-20-8	< 20	Acute Tox. 4 (Oral), H302 Eye Irrit. 2, H319

Full text of H-statements: see section 16

#### 3.2. Mixtures

Not applicable

### SECTION 4: First aid measures

#### 4.1. Description of first aid measures

First-aid measures general : Remove contaminated clothing and shoes. In case of accident or if you feel unwell, seek medical advice immediately (show the label where possible). If possible show this sheet; if not available show packaging or label. IF exposed or concerned: Get medical advice/attention.  
 First-aid measures after inhalation : Remove person to fresh air and keep comfortable for breathing. If you feel unwell, seek medical advice.  
 First-aid measures after skin contact : Wash with plenty of water/... Get medical advice/attention.  
 First-aid measures after eye contact : Immediately flush eyes thoroughly with water for at least 15 minutes. Remove contact lenses, if present and easy to do. Continue rinsing. Get medical advice/attention.  
 First-aid measures after ingestion : Never give anything by mouth to an unconscious person. Get medical advice/attention.

#### 4.2. Most important symptoms and effects, both acute and delayed

Symptoms/effects after inhalation : May cause irritation to the respiratory tract. Overexposure may cause: Cough. Headache. Nausea.  
 Symptoms/effects after skin contact : Causes skin irritation.  
 Symptoms/effects after eye contact : Causes serious eye irritation.  
 Symptoms/effects after ingestion : May be harmful if swallowed.

#### 4.3. Indication of any immediate medical attention and special treatment needed

Note to physician: Application of corticosteroid creams has been effective in treating severe skin irritation. If blisters develop, they may require abrasion to promote healing.

### SECTION 5: Firefighting measures

#### 5.1. Extinguishing media

Suitable extinguishing media : Water spray. Foam. Carbon dioxide. Dry chemical.  
 Unsuitable extinguishing media : Do not use straight streams.

#### 5.2. Special hazards arising from the substance or mixture

Fire hazard : Irritating fumes and organic acid vapors may develop when material is exposed to elevated temperatures or open flame.

#### 5.3. Advice for firefighters

Firefighting instructions : Use water spray to cool exposed surfaces. Exercise caution when fighting any chemical fire.  
 Protection during firefighting : Do not enter fire area without proper protective equipment, including respiratory protection. Avoid all eye and skin contact and do not breathe vapour and mist.

Print date: 06/09/2018

EN (English)

SDS ID: **SNB1710**

2/7

## BIS(NEODECANOATE)TIN, tech-90

### Safety Data Sheet

#### SECTION 6: Accidental release measures

##### 6.1. Personal precautions, protective equipment and emergency procedures

###### 6.1.1. For non-emergency personnel

- Protective equipment : Wear protective equipment as described in Section 8.  
 Emergency procedures : Evacuate unnecessary personnel.

###### 6.1.2. For emergency responders

- Protective equipment : Do not attempt to take action without suitable protective equipment. Equip cleanup crew with proper protection. For further information refer to section 8: "Exposure controls/personal protection".

##### 6.2. Environmental precautions

Prevent entry to sewers and public waters. Notify authorities if liquid enters sewers or public waters.

##### 6.3. Methods and material for containment and cleaning up

- For containment : Contain any spills with dikes or absorbents to prevent migration and entry into sewers or streams.  
 Methods for cleaning up : Clean up any spills as soon as possible, using an absorbent material to collect it. Sweep or shovel spills into appropriate container for disposal.

##### 6.4. Reference to other sections

See Heading 8. Exposure controls and personal protection.

#### SECTION 7: Handling and storage

##### 7.1. Precautions for safe handling

- Precautions for safe handling : Avoid all eye and skin contact and do not breathe vapour and mist. Provide good ventilation in process area to prevent formation of vapour.  
 Hygiene measures : Wash hands and other exposed areas with mild soap and water before eating, drinking or smoking and when leaving work. Wash contaminated clothing before reuse.

##### 7.2. Conditions for safe storage, including any incompatibilities

- Storage conditions : Keep container tightly closed.  
 Incompatible materials : Oxidizing agent. Direct sunlight.  
 Storage area : Store in a well-ventilated place. Store away from heat.

##### 7.3. Specific end use(s)

No additional information available

#### SECTION 8: Exposure controls/personal protection

##### 8.1. Control parameters

Tin(2+) neodecanoate (49556-16-3)		
Italy - Portugal - USA ACGIH	ACGIH TWA (mg/m <sup>3</sup> )	0.1 mg/m <sup>3</sup> as tin

##### 8.2. Exposure controls

###### Appropriate engineering controls:

Provide local exhaust or general room ventilation.

###### Personal protective equipment:

Avoid all unnecessary exposure. Emergency eye wash fountains and safety showers should be available in the immediate vicinity of any potential exposure.

###### Hand protection:

Neoprene or nitrile rubber gloves

###### Eye protection:

Chemical goggles. Contact lenses should not be worn

###### Skin and body protection:

Wear suitable protective clothing

###### Respiratory protection:

Where exposure through inhalation may occur from use, respiratory protection equipment is recommended. NIOSH-certified combination organic vapor/acid gas (yellow cartridge) respirator.

## BIS(NEODECANOATE)TIN, tech-90

### Safety Data Sheet

#### SECTION 9: Physical and chemical properties

##### 9.1. Information on basic physical and chemical properties

Physical state	: Liquid
Appearance	: Liquid. Viscous.
Molecular mass	: 461.23 g/mol
Colour	: Amber.
Odour	: Mild.
Odour threshold	: No data available
Refractive index	: 1.487
pH	: No data available
Relative evaporation rate (butylacetate=1)	: No data available
Melting point	: No data available
Freezing point	: < 0 °C
Boiling point	: No data available
Flash point	: > 110 °C
Auto-ignition temperature	: No data available
Decomposition temperature	: No data available
Flammability (solid, gas)	: No data available
Vapour pressure	: 14 mm Hg @ 140°C
Relative vapour density at 20 °C	: No data available
Relative density	: 1.16
% Volatiles	: < 3 %
Solubility	: Insoluble in water.
Log Pow	: No data available
Log Kow	: No data available
Viscosity, kinematic	: No data available
Viscosity, dynamic	: No data available
Explosive properties	: No data available
Oxidising properties	: No data available
Explosive limits	: No data available

##### 9.2. Other information

No additional information available

#### SECTION 10: Stability and reactivity

##### 10.1. Reactivity

No additional information available

##### 10.2. Chemical stability

Stable in sealed containers stored under a dry inert atmosphere. Oxidizes slowly in the presence of air.

##### 10.3. Possibility of hazardous reactions

Direct sunlight causes slow degradation to an inorganic tin salt.

##### 10.4. Conditions to avoid

Heat. Open flame. Sparks.

##### 10.5. Incompatible materials

Oxidizing agent. Direct sunlight.

##### 10.6. Hazardous decomposition products

Organic acid vapors. Tin oxides.

#### SECTION 11: Toxicological information

##### 11.1. Information on toxicological effects

Acute toxicity : Not classified

##### Neodecanoic acid (26896-20-8)

LD50 oral rat	2000 mg/kg
LD50 dermal rabbit	> 3160 mg/kg
LC50 inhalation rat	> 3000 mg/kg
ATE CLP (oral)	2000 mg/kg bodyweight

Skin corrosion/irritation : Causes skin irritation.

## BIS(NEODECANOATE)TIN, tech-90

### Safety Data Sheet

Serious eye damage/irritation	: Causes serious eye irritation.
Respiratory or skin sensitisation	: Not classified
Germ cell mutagenicity	: Not classified
Carcinogenicity	: Not classified
Reproductive toxicity	: Not classified
STOT-single exposure	: Not classified
STOT-repeated exposure	: Not classified
Aspiration hazard	: Not classified
Symptoms/effects after inhalation	: May cause irritation to the respiratory tract. Overexposure may cause: Cough. Headache. Nausea.
Symptoms/effects after skin contact	: Causes skin irritation.
Symptoms/effects after eye contact	: Causes serious eye irritation.
Symptoms/effects after ingestion	: May be harmful if swallowed.
Reason for classification	: Expert judgment

#### SECTION 12: Ecological information

##### 12.1. Toxicity

Acute aquatic toxicity	: Not classified
Chronic aquatic toxicity	: Not classified

##### 12.2. Persistence and degradability

No additional information available

##### 12.3. Bioaccumulative potential

No additional information available

##### 12.4. Mobility in soil

No additional information available

##### 12.5. Results of PBT and vPvB assessment

No additional information available

##### 12.6. Other adverse effects

Other adverse effects : This substance may be hazardous to the environment.

#### SECTION 13: Disposal considerations

##### 13.1. Waste treatment methods

Sewage disposal recommendations	: Do not dispose of waste into sewer.
Product/Packaging disposal recommendations	: Dispose in a safe manner in accordance with local/national regulations.
Ecology - waste materials	: Avoid release to the environment.

#### SECTION 14: Transport information

##### 14.1. UN number

In accordance with ADR / RID / IMDG / IATA / ADN

##### 14.1. UN number

UN-No. (ADR)	: Not applicable
UN-No. (IMDG)	: Not applicable
UN-No. (IATA)	: Not applicable
UN-No. (ADN)	: Not applicable
UN-No. (RID)	: Not applicable

##### 14.2. UN proper shipping name

Proper Shipping Name (ADR)	: Not applicable
Proper Shipping Name (IMDG)	: Not applicable
Proper Shipping Name (IATA)	: Not applicable
Proper Shipping Name (ADN)	: Not applicable
Proper Shipping Name (RID)	: Not applicable

##### 14.3. Transport hazard class(es)

###### ADR

Transport hazard class(es) (ADR)	: Not applicable
----------------------------------	------------------

## BIS(NEODECANOATE)TIN, tech-90

### Safety Data Sheet

#### IMDG

Transport hazard class(es) (IMDG) : Not applicable

#### IATA

Transport hazard class(es) (IATA) : Not applicable

#### ADN

Transport hazard class(es) (ADN) : Not applicable

#### RID

Transport hazard class(es) (RID) : Not applicable

#### 14.4. Packing group

Packing group (ADR) : Not applicable  
 Packing group (IMDG) : Not applicable  
 Packing group (IATA) : Not applicable  
 Packing group (ADN) : Not applicable  
 Packing group (RID) : Not applicable

#### 14.5. Environmental hazards

Dangerous for the environment : No  
 Marine pollutant : No  
 Other information : No supplementary information available

#### 14.6. Special precautions for user

##### - Overland transport

No data available

##### - Transport by sea

No data available

##### - Air transport

No data available

##### - Inland waterway transport

No data available

##### - Rail transport

No data available

#### 14.7. Transport in bulk according to Annex II of Marpol and the IBC Code

Not applicable

### SECTION 15: Regulatory information

#### 15.1. Safety, health and environmental regulations/legislation specific for the substance or mixture

##### 15.1.1. EU-Regulations

No REACH Annex XVII restrictions  
 BIS(NEODECANOATE)TIN, tech-90 is not on the REACH Candidate List  
 BIS(NEODECANOATE)TIN, tech-90 is not on the REACH Annex XIV List

% Volatiles : < 3 %

##### 15.1.2. National regulations

###### Germany

12th Ordinance Implementing the Federal Immission Control Act - 12.BImSchV : Is not subject of the 12. BImSchV (Hazardous Incident Ordinance)

###### Netherlands

SZW-lijst van kankerverwekkende stoffen : The substance is not listed  
 SZW-lijst van mutagene stoffen : The substance is not listed

Print date: 06/09/2018

EN (English)

SDS ID: SNB1710

6/7

## BIS(NEODECANOATE)TIN, tech-90

### Safety Data Sheet

NIET-limitatieve lijst van voor de voortplanting giftige stoffen – Borstvoeding : The substance is not listed  
 NIET-limitatieve lijst van voor de voortplanting giftige stoffen – Vruchtbaarheid : The substance is not listed  
 NIET-limitatieve lijst van voor de voortplanting giftige stoffen – Ontwikkeling : The substance is not listed

#### 15.2. Chemical safety assessment

No additional information available

#### SECTION 16: Other information

Abbreviations and acronyms:

Abbreviations: ND: Not Determined, No Data; NA: Not Applicable; LD: Lethal Dose; LC: Lethal Concentration; ATE: Acute Toxicity Estimates; H: hour; °: °C unless otherwise stated; mm: millimeters Hg, torr; PEL: permissible exposure level; TWA: time weighted average; TLV: threshold limit value; TG: Test Guideline; NIOSH: National Institute for Occupational Safety and Health; IARC: International Agency for Research on Cancer; NTP: National Toxicology Program; HMIS: Hazardous Material Information System; CAS No.: Chemical Abstract Service Registration Number; EC No.: European Commission Registration Number; EC Index No.: European Commission Index Number; OECD: The Organisation for Economic Co-operation and Development; GHS: The Globally Harmonized System of Classification and Labelling; APF: Assigned Protection Factor

Other information : Prepared by safety and environmental affairs.

Full text of H- and EUH-statements:

Acute Tox. 4 (Oral)	Acute toxicity (oral), Category 4
Eye Irrit. 2	Serious eye damage/eye irritation, Category 2
Skin Irrit. 2	Skin corrosion/irritation, Category 2
H302	Harmful if swallowed.
H315	Causes skin irritation.
H319	Causes serious eye irritation.

SDS EU (REACH Annex II) - Custom

*The information contained in this document has been gathered from reference materials and/or Gelest, Inc. test data and is to the best knowledge and belief of Gelest, Inc. accurate and reliable. Such information is offered solely for your consideration, investigation and verification. It is not suggested or guaranteed that the hazard precautions or procedures described are the only ones which exist. Gelest, Inc. makes no warranties, express or implied, with respect to the use of such information and assumes no responsibility therefore. Information on this safety data sheet is not intended to constitute a basis for product specifications.*

© 2018 Gelest Inc. Morrisville, PA 19067