



Forslag til hovedoppgaver våren 2005

ved

Institutt for kjemisk prosessteknologi

Fagområder/-grupper:

1. Katalyse og petrokjemi
2. Kolloid- og polymerkjemi
3. Prosess-systemteknikk
4. Reaktorteknologi
5. Separasjons- og renseteknikk
6. Papir og fiberteknologi

Katalyse og petrokjemi

EAB: **Professor Edd A. Blekkan**

EAB-1: **Karakterisering av tunge oljer.**
Medveileder: Espen Wangen
Oppgaven er reservert Trine Lise Bakksjø.

EAB-2: **Separasjon av oljer i SARA-fraksjoner.**
Medveileder: Espen S. Wangen.
Oppgaven er reservert Jeanette Hegdal

EAB-3: **Katalytisk hydrogenbehandling: modellstudier**
Medveiledere: Håkon Bergem (SINTEF), Svatopluk Chytil
Oppgaven er reservert Elisabeth Vollebek

EAB-4: **Framstilling av hydrogen fra etanol**
Etanol som kilde til hydrogen kan inngå i et fornybart energisystem, ved at etanol fremstilles fra biomasse. Hydrogenframstilling fra etanol innebærer en rekke utfordringer knyttet til katalysatoraktivitet, selektivitet og deaktivering. I et pågående prosjekt har vi startet arbeidet med å identifisere de beste katalysatorsystemene og reaksjonsbetingelsene. Oppgaven er en eksperimentell studie av etanol steam-reforming til hydrogen, og innebærer katalysatorutvikling og framstilling, karakterisering og aktivitetmålinger (dampreforming av etanol og andre relevante reaksjoner) i en eksisterende apparatur.
Medveileder: Hilde J. Venvik

EAB-5: **Selektiv katalytisk forbrenning av hydrogen**
Katalytisk forbrenning av hydrogen er den eldste kjente heterogent katalyserte reaksjonen, med mange viktige anvendelsesområder knyttet til hydrogen som energibærer og reaktant i kjemiske prosesser. I dette prosjektet er arbeidet rettet mot en ny prosess for katalytisk dehydrogenering av lette alkaner. Katalytisk dehydrogenering av lette alkaner er en etablert kommersiell prosess for å fremstille alkener (propen, butener). Ulemper ved denne prosessen er bl.a. at utbyttet av alkener er begrenset av den termodynamiske likevekten, og at prosessen er endoterm og derfor krever tilførsel av mye varme. I reaksjonen dannes også hydrogen, og et forslag er å forbrenne hydrogen *in situ* for å gi varme til dehydrogeneringsreaksjonen. Ved å fjerne hydrogen vil også utbyttet av olefiner bli større, ved at likevekten forskyves. De mest lovende katalysatorene for dette er Pt-baserte katalysatorer og katalysatorer av ulike metalloksider (f.eks. $\text{Bi}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$ og $\text{In}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$). Oppgaven innebærer framstilling og testing av katalysatorer for selektiv oksidasjon av hydrogen, og utvikling av kinetiske modeller med utgangspunkt i de eksperimentelle resultatene. Det er også aktuelt å studere reaksjonsmekanismen på bakgrunn av litteraturdata, teoretiske beregninger og eksperimentelle undersøkelser.
Medveileder: Hilde Dyrbeck

EAB-6: **A new route to supported metal catalysts**
A new route to preparation of supported metal catalysts involves the formation of metal nanoparticles in suspension, by reduction of a dissolved metal salt. These metal particles are protected by “capping” in a polymer, and the polymer is used as a template in the synthesis of mesoporous materials. This is a route that allows good control of the metal particle size and shape. Typical metal catalysts that can be prepared this way are gold and platinum. The project involves preparation, characterization, and catalytic activity testing using model reactions like hydrogenation, oxidation or hydrolysis of catalysts prepared this way.
Cosupervisor: Svatopluk Chytil

AH: Professor Anders Holmen

AH-1: Fischer-Tropsch katalysatorer på ulike modifiserte aluminabærere.
Medveiledere: Edvard Bergene, Erling Rytter, Øyvind Borg.
Oppgaven er reservert Bjørn Christian Enger

AH-2: Oligomerisering av isobuten over zeolitter
Medveileder: Geir Remo Fredriksen.
Oppgaven er reservert Siri Line Halsen

AH-3: Studier av katalysator for metanolsyntesen
Medveiledere: Magnus Rønning, Karina Heitnes Hofstad, Florian Huber
Oppgaven er reservert Ingeborg Haugros

AH-4: Katalytisk dehydrogenering av propan
Et hovedproblem ved dehydrogeneringskatalysatorer (Pt/bærer, $\text{Cr}_2\text{O}_3/\text{Al}_2\text{O}_3$) er deaktiveringen som følge av koksdannelse ved høye temperaturer. Det er vist at ikke-sure bærere fører til mindre cracking og mindre polymerisasjon enn sure bærere. Dessuten er det blitt vanlig praksis å promotere Pt-katalysatoren med et annet metall, for eksempel tinn. Dette prosjektet fokuserer på utviklingen av reaksjonskinetiske modeller for beskrivelse av propandehydrogeneringen og i særlig grad på deaktiveringen som følge av koksdannelse. De kinetiske modellene skal testes mot eksperimentelle resultater, i første omgang med litteraturverdier og deretter mot egne eksperimentelle resultater.
Medveiledere: De Chen, Rune Lødeng

MR: Førsteamanuensis Magnus Rønning

MR-1: Fremstilling og karakterisering av nanoskala Au og Pt katalysatorer på karbon/oksid bærersystemer

Nanopartikler av gull viser svært høy katalytisk aktivitet for en rekke kjemiske reaksjoner som for eksempel CO oksidasjon dersom partiklene er tilstrekkelig små (< 5 nm). Sammen med nanostrukturerte oksider blir edelmetaller som Au og Pt gode katalysatorer for hydrogenproduksjon via bl.a. metanol reforming og vann-gass skift reaksjonen.

Oppgaven går ut på å fremstille katalysatorpartikler basert på metallene Au og Pt som deretter selektivt skal avsettes på oksidoverflaten på bærersystemet. Bærer består av karbon komposittmaterialer og oksider som TiO_2 og CeLa_xO_2 . Oppgaven vil i tillegg til fremstilling av katalysatorene involvere karakterisering ved hjelp av teknikker som XRD, TGA, TPR, samt katalytisk testing i aktuelle reaksjoner.

Medveiledere: De Chen, Nina Hammer

HV: Førsteamanuensis Hilde Venvik

HV1: Testing og ytelsesvurdering av mikrofordamper for metanol og vann.

I samarbeid med Mikro- og Nanoteknologilaboratoriet (MiNaLab) er det utviklet en miniatyrisert fordamper/fødeenhet. Denne er tenkt benyttet i miniatyriserte brenselcellesystemer som kan bli et alternativ til batterier i PCer og mobiltelefoner. Fordampingen og fødekontrollen er basert på enkle, men potensielt unike prinsipper, som er under vurdering for patentering.

Fordamperbrikken er laget ved hjelp av silisium wafer teknologi som vanligvis benyttes i mikroelektronikk og MEMS (Mikro-Elektro-Mekaniske Systemer, f. eks sensorer). Arbeidet vil være en god anledning til å bli kjent med de spennende mulighetene som krysningsfeltet mellom mikroteknologi og kjemiteknikk representerer. Arbeidet vil bestå i å vurdere og realisere en eller flere måter å teste teknologien på som best kan kvantifisere ytelsen. Hoveddelen av arbeidet vil være eksperimentelt, men avhengig av resultatene og kandidatens interesse kan modellering være aktuelt. Det er allerede foretatt enkle, initiale tester som verifiserer funksjonaliteten.

Medveiledere: Hallvard Svendsen, Bjørnar Arstad

Kolloid- og polymerkjemi

PCM: **Professor Preben C. Mørk**

PCM-1: **Effekt av adsorpsjon av ulike typer lignosulfonater på viskositet av sementpasta.**

Oppgaven utføres i hovedsak på Borregaard R&D i Sarpsborg.

Veileder: Siv.ing. Berit Gudding Petersen

Oppgaven er reservert Camilla Lundberg

JOHS: **Professor Johan Sjöblom**

JOHS-1: **Syntese og karakterisering av kolloidale koboltpartikler i ordnede silikamaterialer**

Koboltbaserte materialer har anvendelser innenfor "hydrotreating" prosesser og Fischer-Tropsch katalyse. Denne oppgaven går ut på å preparere mesoporøse silikastrukturer som inneholder kolloidale koboltoksid partikler. Effekten silikastrukturen har på størrelsen og formen på koboltpartiklene vil bli studert. Materialene vil bli karakterisert ved hjelp av XRD, N₂-adsorpsjon, TEM og FT-IR. Oppgaven utføres ved Ugelstadlaboratoriet

Medveileder: Gisle Øye

JOHS-2: **Syntese og karakterisering av tynne mesoporøse filmer**

Tynne mesoporøse filmer kan ha applikasjoner innenfor separasjon, selektiv katalyse og sensorer. I denne oppgaven benyttes sol-gel dip-coating for å lage silikabaserte filmer. Ulike typer organiske templat (miceller og polymerer) vil benyttes for å studere effekten disse har på porestruktur og porestørrelse i filmene. Materialene vil bli karakterisert ved hjelp av XRD, N₂-adsorpsjon, TEM og FT-IR. Oppgaven utføres ved Ugelstadlaboratoriet

Medveileder: Gisle Øye

JOHS-3: **Reologiske egenskaper for partikkelstabiliserte emulsjoner**

De fleste råoljer inneholder organiske og uorganiske nanopartikler som kan akkumuleres på grensesikt mellom vann og olje, og dermed stabilisere en korresponderende emulsjon. Dette vil redusere kvaliteten på råoljen. Fokuset i denne oppgaven er å karakterisere modell nanopartikler, samt å studere de reologiske egenskapene til modellsuspensjoner og modellemulsjoner. Oppgaven utføres ved Ugelstadlaboratoriet.

Medveileder: Gisle Øye

JOHS-4: **Plasmakjemisk oksidering av asfaltener**

Ved prosessering av olje dannes ofte vann-i-olje emulsjoner (w/o) som et resultat av trykkfall og turbulens i rørledninger. Emulsjonsstabiliteten bestemmes overflateaktive komponenter i råoljen som for eksempel asfaltener og resiner. Distribusjonen av polare grupper på asfaltenene er en viktig parameter med tanke på emulsjonsstabilitet, skumstabilitet og inversjonsegenskaper. Fokuset i oppgaven vil være på anvendelse av plasmakjemiske teknikker for å kontrollere overflatepolariteten til asfaltener, og videre studere hvordan polariteten påvirker solubilitet og emulsjonsstabilitet.

Oppgaven utføres ved Ugelstadlaboratoriet

Medveileder: Gisle Øye

JOHS-5: **Transport av gass hydrater i olje, effekt av polar råoljefraksjon**
Oppgaven er reservert Hanne E. Pettersen

JOHS-6: **Dråpestørrelse av vann-i-olje emulsjoner, korrelasjon mot emulsjonstabilitet**

Dråpestørrelse av den dispergerte fasen i en emulsjon er av fundamental betydning for emulsjonsegenskaper slik som koalesens, viskositet og separasjonsforløp. For vann-i-olje emulsjoner er det

problematiske å bruke optiske eller lys-sprednings metoder for bestemmelse av dråpestørrelse, da emulsjonen ikke er transparent. Puls-felt gradient NMR er en metode som kan brukes på vann-i-olje emulsjoner og også på svært konsentrerte emulsjoner. Oppgaven går ut på å måle dråpestørrelse for vann-i-olje systemer, både fra råoljer og modelloljer og undersøke hvordan ulike miksemetoder og råoljekomponenter (asfaltener, resiner, naftensyrer) påvirker dråpestørrelsen. Videre vil man bestemme emulsjonstabiliteten ved bruk elektrokoalensens (E-crit) eller lys-spredning (TurbidScan) og undersøke hvilken effekt dråpestørrelsen har for emulsjonstabiliteten.

Sted: Ugelstadlaboratoriet

Veileder: Pål Hemmingsen

JOHS-7: Produsert vann, hva stabiliserer oljedråpene?

På oljefeltene ute i Nordsjøen produseres det sammen med oljen store mengder vann, og mengden vil øke i fremtiden. På dette produserte er det strenge krav om hvor mye olje det kan inneholde for det slippes ut. Ved en evt. utbygging i Lofoten så vil utslippskravene være enda strengere. En del felter sliter i perioder med å holde seg innenfor utslippsgrensene og det er derfor viktig å forstå mekanismene for hva som stabiliserer olje dråpene i vannet. Ugelstad Laboratoriet har startet et forskningsprogram sammen med Inst. for vann –og miljøteknikk, Sintef vann og miljø, Statoil, Total, Shell og ChevronTexaco for å utvikle bedre metoder for vannbehandling.

Oppgaven vil gå ut på å undersøke forskjellig faktors betydning for olje-i-vann stabilitet. Dette vil være faktorer slik som olje egenskaper, oljesammensetning, partikler, produksjonskjemikalier etc. Emulsjonstabiliteten/separasjonsegenskaper vil bli målt ved bruk av et lys transmisjon/spredning instrument som skanner emulsjonen (TurbidScan). Det er også av interesse å teste vannbehandlings-utstyr på olje-i-vann emulsjoner med ulike stabiliseringsmekanismer.

Sted: Ugelstadlaboratoriet

Veileder: Pål Hemmingsen

JOHS-8: Kontinuerlig separasjonsrigg, studie av emulsjonssjiktet

I olje industrien benyttes ofte såkalte flasketesten for å teste separasjonsegenskapene til en olje. I noen tilfeller kan systemer som viser god separasjon i en flaske test (batch system) gi et stabilt emulsjonslag ved kontinuerlig prosessering. Dette fordi enkelte komponenter, overflate aktive substanser og partikler, samler seg i grensesjiktet mellom olje og vann, slik at den lokale konsentrasjonen øker. Det er derfor av interesse å studere hvordan den lokale konsentrasjonen av stabiliserende komponenter i emulsjonssjiktet endrer seg over tid i en kontinuerlig prosess, og hvorvidt dette kan danne veldig stabile emulsjonslag.

Oppgaven vil gå ut på å studere modelsystemer i en kontinuerlig separasjonsrigg og sammenligne med oppførselen i batchsystemer.

Sted: Ugelstadlaboratoriet

Veiledere: Martin Fossen, Pål Hemmingsen

JOHS-9: Studie av polaritet for tunge komponenter i råolje basert på Hansen løselighetsparametre

Målsetningen med oppgaven er å undersøke muligheten for bestemmelse av polaritet for råoljer. Basert på Hansen løselighetsparametre skal det velges flere løsningsmidler som har en stor variasjon i de forskjellige parametrene.

Den eksperimentelle delen av arbeidet vil bestå av titrering av de utvalgte løsningsmidlene mot flere forskjellige råoljer. NIR-spektroskopi benyttes for å detektere utfellingspunktet og dermed mengden tilsatt løsningsmiddel ved utfelling.

Basert på mengde tilsatt løsningsmiddel og de respektive løselighetsparametrene vil studiet:

1. Bestemme løselighetsparametre for råoljene
2. Vise om det er noen av de tre Hansen løselighetsparametrene som betyr mer for utfelling av tunge komponenter i råoljer

Sted: Ugelstadlaboratoriet

Veiledere: Martin Fossen, Pål Hemmingsen

Prosess-systemteknikk

THz: **Professor Terje Hertzberg**

THz-1: Modelltilpassing i systemer av ikke-lineære, ordinære differensial-ligninger.

Ved parameterestimering i systemer beskrevet av ordinære differensialligninger blir beregningstiden høy hvis man benytter et generelt program for modelltilpassing som f.eks MODFIT. Dette skyldes spesielt tungvint bestemmelse av Jacobi-matrisen ved perturbasjon av parametrene. Jacobi-matrisen kan imidlertid beregnes med lite ekstra ”kostnader” ved å integrere ”følsomhetsligningene” simultant med modelligningene. Dette ble implementert i et program-system, COLPAR, av T. Hertzberg i FORTRAN for mange år siden. Her må brukeren i tillegg til å kode høyresiden i difflikningene også lage en rutine for de deriverte av høyresiden mhp parametrene. I COLPAR blir differensiallikningene diskretisert ved ortogonal kollokasjon og integrasjonen gjort simultant over hele ”tidshorisonten”.

Oppgaven går ut på å lage en moderne utgave av COLPAR i MATLAB hvor blandt annet de analytiske deriverte av høyresiden i difflikningene genereres automatisk ved hjelp av Symbolic Toolbox eller Maple.

Innledende arbeid rundt automatisk differensiering og løsning av differensial- og sensitivitetslikningene med ortogonal kollokasjon er gjennomført i et fordypnings-prosjekt høsten 2002 (G. Aaboen).

Interesse for matematikk, numeriske metoder og programmering er en fordel.

THz-2: Optimalisering av adsorber i C5 og C6 isomeriseringsanlegg på Mongstad.

I dag benyttes adsorpsjonsanlegg for separasjon av iso/normalparafiner basert på zeolitt som adsorbent. Raffinatet i disse prosessene inneholder forgrenede og sykliske isomerer som brukes til høyoktan bensin eller jet drivstoff.

Målet med dette arbeidet er å optimalisere driften av anlegget på Mongstad.

Oppgaven går ut på å lage en modell av adsorberanlegget med både adsorpsjon og desorpsjon. Anlegget består av flere kolonner i parallell og arbeidet vil bestå i å benytte gPROMS til modellering og optimalisere driften av anlegget.

Oppgaven er en videreføring av tilsvarende oppgave våren 2003. (S. Undheim) og skal spesielt se på problemer rundt bestemmelse av ”syklisk stasjonærtilstand” som er en forutsetning for optimaliseringen.

Interesse for modellering og numeriske metoder er en fordel.

THz-3: Dynamisk simulering i HYSYS

Hensikten med oppgaven er å prøve ut dynamisk simulering i HYSYS på et større eksempel.

Et aktuelt eksempel er reaktordelen av metanolfabrikken på Tjeldbergodden.

I lavtrykks metanol syntesen blir syntesegass (CO , CO_2 og H_2) omsatt til metanol (CH_3OH) i en fixbed reaktor fylt med $\text{Cu/Zn/Al}_2\text{O}_3$ katalysator. Reaksjonen er eksoterm, og MP-damp produseres i reaktoren.

Ureagert syntesegass blir separert fra råmetanolen, komprimert og resirkulert. Syntesegassen blir varmevekslet med reaktorproduktet for forvarming.

Det er utført en dr.ing. oppgave av Ingvild Løvik 2001 hvor gPROMS ble benyttet til simuleringen av samme anlegg. Data kan hentes herfra.

Oppgaven krever interesse for modellering og bruk av dataverktøy.

SiS: **Professor Sigurd Skogestad**

SiS-1: Regulering og optimal drift av CO₂ kjøleprosess.

Oppgaven utføres i samarbeid med SINTEF Kuldeteknikk og Statoil.

Kjøleprosesser er meget utbredt, men selv om det finnes mye litteratur om optimal design og termodynamisk virkningsgrad, viser det seg at det finnes svært lite om optimal drift. Det er her interessant å merke seg at selv i det nominelle operasjonspunktet er ikke optimal drift det samme som optimal design. Vi har innledningsvis sett på meget enkle kjølekretser, av typen man finner i kjøleskap og AC-anlegg, men vi går nå videre til mer kompliserte kjølekretser.

Oppgaven vil basere seg på dynamiske og statiske simulering (f.eks. med Matlab eller gProms), men også eksperimentelle forsøk er mulig.

Litteratur: http://www.nt.ntnu.no/users/skoge/publications/2005/jensen_escape15_cycle/

Medveileder: Jørgen B. Jenssen.

SiS-2: Optimal drift og regulering av kompressorer for LNG-anlegg

Oppgaven utføres i samarbeid med Statoil.

Medveileder: Jørgen B. Jenssen.

SiS-3: Reguleringsstrukturer i biologiske metabolske nettverk.

Oppgaven går ut på å studere i hvilken grad naturen (dvs. biokjemiske systemer) bruker foroverkobling og tilbakekobling. Rent konkret mener Savageau at foroverkobling brukes for en bestemt biokjemisk reaksjon mens Skogestad mener at det er snakk om tilbakekobling med kaskaderegulering. Oppgaven vil bl.a. innebære å sette opp en Matlab-modell av de biokjemiske reaksjonene for en konkret biosyntese.

Litteratur:

M.A. Savageau, G. Jacknow, "Feedforward inhibition in biosynthetic pathways", J.theor.Biol., vol. 77, 405-425 (1979)

M.A.Savageau, "A theory of alternative designs for biochemical control systems",

Biomed.Biocomputing, vol. 44, 875-880 (1985), W.S.Hlavacek, M.A.Savageau, "Subunit structure of regulatory proteins influences the design of gene circuitry: Analysis of perfectly coupled and completely uncoupled circuits". J.Mol.Biol., vol. 248, 739-755 (1995).

SiS-4: Enkle regler for PID-tuning: Utvidelse til å dekke ustabile og svingende systemer

Oppgaven går ut på å utvide Skogestad's regler (SIMC) til å omfatte også ustabile prosesser.

SiS-5: Dynamisk modellering, simulering og regulering av brenselceller

Det har vært skrevet en god del om dynamikk av brenselceller, men ikke så mye om regulering.

Oppgaven skal se på regulering og optimal drift av en ny type lavtemperatur PBI-brenselceller.

Litteratur: http://www.nt.ntnu.no/users/skoge/publications/2004/zenith_aiche04/

Medveileder: Federico Zenith

SiS-6: Selection of variables for regulatory control

Every real process requires a control system for its operation in presence of unforeseen circumstances. During the past few decades, though a number of algorithms have been developed for controller design, the issue of selection of controlled and manipulated variables remain unsolved. In process industries, these decisions are often taken heuristically, which has an adverse effect on safe and economic operation. In this project, a systematic approach will be developed for selection of variables for regulatory control purposes, i.e. system stabilization and disturbance rejection. The project will involve some theoretical developments followed by application to some benchmark chemical processes. Some background in process control and basic linear algebra would be beneficial, but what would matter most is enthusiasm!

Medveileder: Post-doc. Vinay Kariwala

SiS-7: Regulering av Kaibel destillasjonskolonne

Kaibel-kolonnen har en delende vegg i midstseksjonen og to sidestrømmer som gjør det mulig å få fire rene produkter i en kolonne. Normalt trenger man tre kolonner for å få til dette. Det er derfor muligheter for meget store besparelser i kapitalkostnadene - kanskje en halvering. I tillegg er kolonnen energibesparende i forhold til tre normale kolonner. Vi holder nå på å bygge opp en eksperimentell kolonne, og vi regner da med å kunne utføre verdens første eksperimenter med regulering. Oppgaven går ut på å delta i byggingen av kolonnen og i å studere kolonnen teoretisk med bruk av statiske og dynamiske modeller, f.eks. i Matlab.

Medveiledere: Jens Strandberg og Professor Heinz Preisig

SiS-8: Modellering, sammensetningsestimering og regulering av destillasjonskolonne.

Vi har i samarbeid med bygget opp en eksperimentell destillasjonskolonne med instrumentering og regulering nær det man finner i en industriell kolonne. Kolonnen separerer metanol og vann, og on-line målinger av sammensetning mangler. I stedet skal det utvikles en enkel PLS-estimator basert på temperaturmålinger. Det skal studeres om man kan basere en slik estimator på simuleringer med færrest mulig eksperimentelle målinger. Det skal også ges en "brukermanual" for praktisk drift og regulering av kolonnen.

For bilde av kolonnen se her: <http://www.nt.ntnu.no/users/skoge/diplom/diplom05/destillasjon/>

Oppgaven er reservert Ingela Reppe

SiS-9: Avansert regulering av destillasjonskolonne.

Oppgaven skal bruke samme eksperimentelle kolonne som nevnt over.

Oppgaven er reservert Jørgen Kringen Johnsen, Tekn. Kyb.

Veileder: Morten Hovd

HP: Professor Heinz Preisig

HP-1: Fysikalske kolonnemodeller for bruk i MPC

Bakgrunn

Modellbasert prediktiv regulering (MPC) får stadig større utbredelse i prosessindustrien. For tiden er det for eksempel i Statoil nær 30 prosessavsnitt som reguleres med MPC. På gassbehandlingsanlegget på Kårstø står en nå overfor en storstilt innføring av MPC på over 20 destillasjonskolonner.



Til nå har de aller fleste MPC installasjonene vært basert på empiriske modeller utledet fra data fra forsøk i prosessen. Dette gjelder også i Statoil. I denne oppgaven skal en undersøke om det er mulig å frembringe fysikalske modeller som er nøyaktige og raske nok til å kunne brukes online av en MPC.

Prof. Heinz Preisig ved Institutt for kjemisk prosesssteknologi har ledet utviklingen av et modellutviklingsverktøy, *Modeller*. En del av oppgaven vil gå med til å forstå modelleringsprinsippene i dette verktøyet.

Oppgavetekst

Utvikle en modell av en butansplitter på Kårstø ved hjelp av verktøyet *Modeller*. Modellen skal testes mot måldata. Vis at modellen er rask nok til å kunne benyttes online av en regulator (MPC)

Veiledere: Prof. Morten Hovd (Inst.for teknisk kybernetikk)

Håvard Nordhus og Audun Faanes (73 58 49 01), Statoil Prosesskontroll, Rotvoll

HP-2: Sustainable water management in domestic environments

Daily contact Heinz A. Preisig

Project description: We have recently completed a PhD in the area of sustainable water system for households. This project is extremely multi-faceted, as a large number of problems do exist in this field.

I invite interested students to contact me for a discussion of possible projects in this field.

HP-3: Modelling of membrane reactor

Membrane reactors are more and more commonly used in technical applications. One of the main applications being electrical fuel cells but also large-scale industrial reactors.

Design and operation procedures are based on (dynamic) models, which are rather complex indeed, as these systems are distributed, reactive flow systems. We are interested in testing a model design tool for these types of processes. The objective is to describe the process as an approximate distributed system, that is, to approximate the partial differential equations by sets of ordinary differential equations, and look at different ways of handling the fast reactions taking place in the system. We shall link this study to an industrial case.

Supervisor: John Morud (SINTEF)

Reaktorteknologi

HSV

Professor Hallvard Svendsen

HSV-1: CO₂ absorpsjon: Modellering absorber og pilotforsøk.

For å få til en optimalisering av absorpsjonstårn og best mulig energiutnyttelse, er det nødvendig med stadig bedre modeller for tårnet og for likevekter og kinetikk i de kjemiske systemene som brukes. Man snakker i dag om såkalte "rigorøse" modeller som ikke bare modellerer f. eks. partialtrykket av CO₂ over en løsning som inneholder en gitt mengde CO₂, men også modeller som er aktivitetskoeffisientbaserte og som predikerer fordelingen av de ulike kjemiske komponentene, ioniske så vel som ikke ioniske, som funksjon av CO₂-innhold og temperatur. En eksisterende absorbermodell skal oppgraderes slik at den kommer på linje med en eksisterende desorbermodell. Videre skal det utføres forsøk i pilotapparat i Hall C og resultatene skal brukes til validering av modellen.

Veiledere: Jørgen Løvland, Jana Poplsteinova

Oppgaven er reservert Vivian Valvatne

HSV-2: CO₂ absorpsjon: Likevektsmålinger.

Som nevnt i forrige oppgave så er det et stort behov for bedrede likevekts og kinetikkmodeller for ulike absorpsjonssystemer. For validering av disse modellene trenger vi gode eksperimentelle data. Vi har ved instituttet en nyutviklet likevektsapparat for høye trykk og temperaturområder. Denne apparaturen er bygd opp høsten 2004 og det skal kjøres både binære(absorbent/vann) og ternære(CO₂/absorbent/vann) likevekts-målinger. Modellering av likevektene vil også være aktuelt. Apparaturen er operativ og assistanse fra SINTEF kan også påregnes.

Veiledere: Terje Vassbotten, Karl Anders Hoff og Olav Juliussen

Oppgaven er reservert Bijal Patel

HSV-3: Viscosity Measurements and Correlations of Mixtures Relevant to the Processing of Reservoir Fluids

Removal of dispersed liquid droplets from high pressure gas streams is a very important problem in the processing of gas on the Norwegian Continental shelf. Existing and new sub-sea installation require equipment with very good performance and regularity. The research program HiPGaS (High Pressure Gas Separation) in the Reactor technology group aims at enhancing the knowledge of the mechanisms that are important for this separation. One important aspect is the transport and thermodynamic properties of the gas/liquid system, and good data and models for the liquid viscosity are essential to predict droplet coalescence and break-up of films. In addition the viscosity of petroleum fluids is an essential property for the evaluation, simulation and development of petroleum reservoirs, production facilities and transport systems. Despite the importance of viscosity in the evaluation of these processes, its estimation (in most process simulators) has been based on models with limited applicability. As oil and gas fields are being discovered at increasingly more severe temperature and pressure conditions, the applicability of these models to relevant processing conditions diminishes each year. Recent measurements have helped extend the understanding of these fluid systems under severe conditions, but new experimental measurements are required to expand the data set required for the validation and the development of new predictive models.

Since the compositions of reservoir fluids vary depending on the source reservoir and the types of processing the fluid encounters, it is almost impossible to measure the viscosity of all these fluids at the pressure, temperature and composition ranges these fluids might encounter. Therefore, models that can successfully predict the viscosity of multi-component mixtures over the expected ranges are of great interest those involved in oil and gas processing. As such, an experimental framework, which is suited for the development and validation of these models, has been developed. This

experimental program will consist of well-defined mixtures of components inherently found in reservoir fluid processing and real reservoir fluids.

The initial stage of this project will be for the student(s) to gain competence on the high pressure rotational viscometer at NTNU to ensure accurate and repeatable results are acquired. Secondly, to use the viscometer to measure the viscosity of the relevant mixtures at elevated pressures and a variety of temperatures. Finally, to investigate the applicability of some recent viscosity modelling approaches to correlate/predict the acquired data.

Veileder PhD-student Kurt Schmidt

Oppgaven er reservert Steinar Hellesøy

HSV-4: Videreutvikling av ColdFlow simulator i Matlab.

Bakgrunn: SINTEF jobber med kommersialisering og pilottesting av den såkalte ColdFlow teknologien for håndtering av hydrater ved rørtransport (se Gemini nr. 5 2003

<http://www.ntnu.no/gemini/2003-05/28-29.htm>).

Oppgave: I forbindelse med design av en pilotloop for testing av ColdFlow teknologien har SINTEF utviklet en simulator beregnet på dimensjonering av dette anlegget. Denne simulatoren (skrevet i MatLab) ønskes videreutviklet og dokumentert. I tillegg ønsker SINTEF å videreutvikle simulatoren slik at den kan benyttes i forbindelse med forsøksplanlegging i den nye pilotloopen.

Veiledere: Dr. John Morud og Paal Skjetne, SINTEF Materialer og Kjemi

Prof. Roar Larsen, SINTEF Petroleumsforskning/NTNU

Oppgaven er reservert Ramona Jeanette Overgård

HSV-5: CFD simulering av dråpefordeling i fordelersystemet til en fluid-bed reaktor. (CFD: Computational Fluid Dynamics / numerisk strømningsmekanikk).

Bakgrunn: SINTEF har gjennomført CFD studier av polyetylen fluid bed reaktorer for Borealis. Borealis ønsker å vurdere effekten av oppskalering av reaktorer ved bruk av CFD studier.

Oppgave: Sammenligne simuleringer av oppskalert reaktor med tidligere studier gjort i SINTEF. Gjennomføre et parameterstudium med hensyn på geometri utforming, og dråpestørrelsesfordeling . Oppgaven vil benytte strømningskoden FLUENT. Det forutsettes at studenten har interesse for eller god bakgrunn innen fluidmekanikk. Geometri representasjon vil bli gjort av SINTEF. Oppgaven vil være båndlagt.

Medveiledere: Hugo Jakobsen, Dr. Paal Skjetne, John Morud og Rune Engeskaug, SINTEF Materialer og Kjemi

HAI Professor Hugo Atle Jakobsen

HAI-1: Modellering av Fluidized bed reaktor for reforming m/adsorbenter.

Simulering av reformer m/adsorbenter i en flerfasestrømningsmodell for fluidized bed reaktorer. Arbeidet fokuseres mot å implementere reformeringsprosessen i en eksisterende modell for partikkelstrømningen i fluidized bed reaktorer (multi-fluid model basert på granulærteori).

Kinetikken til adsorbentkjemien vil bli tilpasset til en passende modell av PhD student Hans Kristian Rusten i samarbeid med De Chen og PhD student Esther Ochoa Fernandez (som utfører den eksperimentelle delen av arbeidet). Implementeringen vil bli gjort i FORTRAN. Utfordringen er å få implementert kjemien vha en kjapp løser. Basert på denne modellen skal dere designe passende reaktorstørrelser og reaktorutforming for den gitte prosessen. Vi kan ta utgangspunkt i omsetningen i reformeren på Statoil's anlegg og deretter forsøke å optimalisere (reducere utgifter for materialkostnader pga lavere **temperatur, mindre volum, lavere trykk?**) vha adsorbenter ... etc.

Medveiledere: Håvard Lindborg og Hans Kristian Rusten

Oppgaven er reservert Erik Trøien Hessen

HAJ-2: Valg av diskretiseringsskjema for løsning av populasjonsbalansemodeller.

Carlos Dorao har utviklet et diskretiseringsskjema for å løse populasjonsbalanse modeller på en spesielt effektiv måte. I oppgaven tar vi utgangspunkt i et sett av populasjonsbalanseformuleringer tilpasset ulike fysiske systemer hvor det fins analytiske løsninger, og vi evaluerer en gruppe mye brukte diskretiseringsskjema (5-6 stykker) for å vise at Doraos metode er å foretrekke. Carlos vil forklare modellen og alle algoritmene som skal implementeres. Basisteorien er beskrevet i en fersk review-artikkel. Først tar vi utgangspunkt i en batch modell med kun kildeleddene og tidsledd, deretter utvider vi til 1D også. Til denne analysen implementeres skjemaene i MATLAB.

Medveileder: Carlos Dorao

Oppgaven er reservert Geir Haugen

HAJ-3: Simulering av CO₂ -absorpsjon gjennom en membran.

Ved instituttet er det utviklet en modell for å beskrive CO₂-absorpsjon gjennom en membran. Modelligningene er forsøkt løst både ved hjelp av 'finite volume' FV- og 'finite difference' FD metoder. FD metoden er implementert i matlab og konvergerer rimelig raskt, men det er problemer knyttet til massebevarelse. FV algoritmen er implementert i et fortranprogram og sikrer at massen er bevart i systemet, men løsningen av det resulterende sett av algebraiske ligninger er relativt tidkrevende. Oppgaven går ut på å optimalisere FV løseren og evaluere fordeler og ulemper ved de to løsningsalgoritmene, både for uniforme og ikke-uniforme grid.

Prosjektet vil gi en innføring i matlab og i fortranprogrammering, noe som er nyttig for studenter som vurderer å arbeide innen separasjonsteknologi/reaktorteknologi/strømning. Videre har arbeidet mye til felles med noen av de andre oppgavene og samarbeid kan være nyttig.

Medveileder: Hallvard F. Svendsen

Separasjons- og renseteknikk

M-B.H **Professor May-Britt Hägg**

M-BH-1. Teknisk–økonomisk evaluering av prosess for oppgradering av biogass med membraner

Det er ønskelig å få evaluert en membranprosess for $\text{CO}_2 - \text{CH}_4$ separasjon gjennom å utføre et prosessdesign (membranmoduler med tilknyttede enheter) og kostestimere dette. Fokus for prosessen skal være anriking av metan (CH_4) fra biogass, og resultatet skal sammenliknes med konvensjonelle, konkurrerende teknologier som for eksempel Pressure Swing Adsorption (PSA).

Målet for oppgaven er:

- Å utvikle og kostestimere en innovativ membranprosess
- Å definere (gjennom simuleringer) nødvendige separasjonsegenskaper for membranen gjennom sensitivitetsanalyse av den foreslåtte prosess

Oppgaven vil kunne innbefatte (omfang kan diskuteres):

1. Sette en design basis og foreslå et prosessdesign
2. Simulere den foreslåtte prosessen i HYSYS ved bl.a. å benytte en membranmodul tilgjengelig “in-house”, og ellers andre standard tilgjengelige moduler i programmet
3. Kostestimere og utføre sensitivitets analyse ved for eksempel å benytte programmet Icarus
4. Sammenlikne med andre tilgjengelige teknologier (PSA)
5. Sammenlikne dine resultater for optimal membranegenskaper med oppnådde eksperimentelle resultater for en (“in-house”) karbonmembran, foreslå retning for videre utvikling av denne membranen.
6. Om interesse, videre utvikling av “in-house” membran modulen dersom programmering er av interesse.

Krav til forkunnskaper: Standard prosesstekniske fag; interesse for simuleringer (HYSYS)

Prosjektet skal være et viktig innspill til pågående forskning innen alternative energikilder, samt et større prosjekt som forventes startet opp våren 2005 med Danmark og Russland – ta kontakt for mer informasjon!

Medveileder: Stipendiat David Grainger

M-BH-2: Karbonmembraner for naturgass- og hydrogensamfunnet

Ved hjelp av to programmerbare høytemperaturovner som finnes i laboratoriet er det mulig å fremstille mikroporøse karbonmembraner med porestørrelser mindre enn 1 nanometer.

Utgangsmaterialet kan være en biopolymer, som for eksempel cellulose, eller en syntetisk polymer. Modifisering av en membran kan gjøres ved hjelp av tilsetninger før filmdannelsen, eller ved CVD (chemical vapour deposition) på en eksisterende karbonmembran.

Mål for oppgaven:

- Å fremstille en karbonmembran med porestørrelse som er ”skreddersydd” for separasjon av hydrogen og metan ($\text{H}_2 - \text{CH}_4$)
- Å karakterisere denne membranen ved å utføre permeasjonsmålinger for fluks og selektivitet for de aktuelle gasser, og evt. elektronmikroskopi/ infrarød spektroskopi

Oppgaven vil innbefatte:

1. Innledende litteraturundersøkelser for å skaffe en oversikt over CVD parametre, typiske verdier av disse, og deres innvirkning på membranytelsen

2. Ved pyrolyse å fremstille en mikroporøs membran fra oppgitt (bio)polymer (standard prosedyrer er tilgjengelig)
3. Å skreddersy porestørrelsen for separasjon H_2-CH_4 ved hjelp av CVD
4. Karakterisere membranen ved permeasjonsmålinger av de aktuelle gassene, og analyser av materialet.

Krav til forkunnskaper: Ingen spesielle, men må like lab.arbeid

Prosjektet er en del av forskning som gjøres innen et stort EU-prosjekt; NATURALHY – for mer informasjon om dette, ta kontakt!

Medveileder: Stipendiat David Grainger ("back-up" stipendiat Jon A. Lie)

M-BH-3: "Mixed matrix" membraner (nanokompositter) for $CO_2 - CH_4$ separasjon

Kommersielt tilgjengelige membranmoduler for gass er pr. i dag i hovedsak fremstilt av polymere materialer. Disse materialene har mange fordeler; de er rimelige, har høy mekanisk styrke, og kan lett prosesseres. Imidlertid er fortsatt anvendelsen begrenset pga. relativt lave selektiviteter og moderate permeasjonsflukser for den permeerende komponent (som for eksempel CO_2). Dette gjør at det er vanskelig å anvende membranene for store volumstrømmer gass. Uorganiske membraner som zeolitter og karbonmembraner kan ha meget gode separasjonsegenskaper, men være vanskeligere (og dyrere) å prosessere, og er mer sårbare mht. mekanisk styrke. Ved å kombinere disse to typer materialer (polymere + uorganiske) kan man fremstille en såkalt "mixed matrix" membran, hvor den uorganiske fasen dispergeres i den polymere. Dokumenterte forsøk viser at disse membranene vil ha meget god mekanisk styrke, og bedre separasjonsegenskaper enn de rene polymere. I den anbefalte oppgaven vil karbonmembraner (CMS) utgjøre den uorganiske fasen, mens polyimiden Matrimid® vil være den kontinuerlige fasen. Fokus for separasjonen er gassene $CO_2 - CH_4$

Mål for oppgaven:

- Å fremstille en "mixed matrix membran" med optimaliserte separasjonsegenskaper for $CO_2 - CH_4$

Oppgaven vil innbefatte:

1. Å lage en karbonmembran (CMS) ved å benytte pyrolyse (standard prosedyre tilgjengelig) som nedknuses, og skal utgjøre den uorganiske fasen i MM-membranen
2. Å blande inn de nedknuste CMS partiklene i en løsning med polyimid
3. Utfra blandingen lage en flat MM-membran (standard prosedyre finnes)
4. Karakterisere CMS membranen og den ferdige MM-membranen med standard teknikker (permeasjonsmålinger; evt. SEM og FT-IR)

Krav til forkunnskaper: Ingen spesielle; må like lab.arbeid

Prosjektet vil gi viktige innspill til pågående prosjekter innen forsknings-programmet NANOMAT (NFR), hvor der er samarbeid med North Carolina State University – ta kontakt for mer info!

Medveileder: Stipendiat Tone Borge

NoN: Professor Norvald Nesse

NoN-1: Nanofiltrering av saltløsninger.

Nanofiltreringsmembraner har vanligvis ladede molekyllgrupper i overflaten. Dette gir membranene en ekstra virkning idet det ikke bare er porestørrelsen som bestemmer separasjonsevnen, men også ladningene på membranen og ionestyrken i løsningen. Ved nanofiltrering kan man f.eks skille to-verdige og enverdige ioner, positive eller negative, avhengig av ladningene på membranen. Separasjonsevnen er også avhengig av pH og av trykket over membranen.

I denne oppgaven ønsker vi å gå videre med undersøkelser som tidligere er arbeidet med i dr.-arbeidet til Edvard Sivertsen, i høstprosjektet til Trond Haldorsen samt i et prosjekt som dr. Pardon Kuipa fra Zimbabwe for øyeblikket holder på med. Apparaturen er nesten klar til bruk. Analysemetodene er etablerte.

NoN-2: Fjerning av fluor fra drikkevann.

Noen steder, bl.a. i Rift Valley-området i Etiopia og i visse områder i India, inneholder grunnvannet store mengder fluorider, helt opp mot 20-25 ppm. Befolkningen i disse områdene er for en stor del avhengige av grunnvannet til drikkevann. Dette fører til at de rammes av fluorose, en lidelse som først angriper tennene slik at disse blir sterkt misfarget og deformert, senere skades skjelettet med invaliditet eller død som følge.

Verdens helseorganisasjon har satt en grense for fluor i drikkevann på 0,5 -1,5 ppm, i tropiske strøk der drikkevannbehovet er stort til 0,8 ppm.

Fluorid kan fjernes ved revers osmose eller nanofiltrering, men er forløpig lite undersøkt. Det finnes mange kommersielt tilgjengelige membraner som antagelig er brukbare til dette formålet. I denne oppgaven ønsker vi å kartlegge problemer og muligheter ved fjerning av fluor fra drikkevannet ned til et akseptabelt nivå med membraner. Apparaturen er etablert, fluoranalysene må delvis utføres eksternt.

Oppgaven har tilknytning til et planlagt prosjektsamarbeid med University of Addis Ababa i Etiopia.

NoN-3: Oppholdstidsfordeling for vannstrømmer i hulfibermoduler.

Både på innsiden og utsiden av fibre i en hulfibermodul vil det være betydelig forskjell i oppholdstiden inne i modulen for de enkelte væskeelementer som tilføres. For den strømmen som går på innsiden av fibre skyldes dette at den hydrauliske motstanden kan være ulik fra fiber til fiber. På utsiden av fibre er årsaken ujevn pakketetthet av fibre langs de ulike væskebanene. I begge tilfeller vil et sprang i konsentrasjonen av et merkestoff i innløpet føre til en mer eller mindre langstrakt respons i utløpsstrømmen.

Målingene vil utføres på små moduler beregnet for hemodialyse, og sprangresponsen registreres ved ledningsevne måling i utløpsstrømmen.

Metoden er etablert i en tidligere hovedoppgave av en spiralviklet modul.

Medveileder: Tom Dagstad

NoN-4: Heat transfer in a stirred tank

Earlier investigations (diploma work by Elisabeth Thorbjørnsen) have brought new knowledge about heat transfer to a liquid with non-Newtonian rheology in a stirred tank with baffles. There are clear indications that the correlations used for Newtonian liquids have limited value when the liquid is non-Newtonian.

In this project the aim is to verify earlier measurements and to extend the experiments into new ranges of the most important parameters. This extensions implies new positioning of the baffles, and also to use an impeller with different geometry.

The experimental setup will be ready after some minor modifications.

Co-advisors: Hallvard Svendsen/Rune Engeskaug

The project is reserved for Serena Motta

NoN-5: Rensing av industrielt prosess- og avløpsvann ved kombinasjon av inndamping og oksidasjon.

I økende grad er det behov for rensing av ulike prosess- og avløpsvann fra industri og annen kommersiell virksomhet. Behovet kommer som en konsekvens av flere forhold, bl.a. strengere myndighetskrav på utslipp, ønske om reduserte vannkostnader gjennom økende gjenbruk, utnyttelse av restråstoffer som finnes i utslippsvann. Eksempler på "problemvann" er bl.a:

- Prosessvann fra papir- og massebruk
- Avløpsvann fra næringsmiddelindustri
- Svartvann fra skip

I oppgaven vil man fokusere på :

- Opparbeiding av teoretisk kunnskap om teknologiene inndamping og oksidasjon
- Konkretisering av de aktuelle rensesituasjoner og klarlegging av rensekraft
- Kartlegging av initielle væskeegenskaper og eventuelle behov for forbehandling
- Eksperimentell utprøving av renseteknologier, individuelt og i kombinasjon samt med eventuell forbehandling
- Anbefaling basert på oppnådde eksperimentelle resultater.

Oppgaven vil bli gjennomført i nært samarbeid med EPCON og med norsk industri som representerer de ulike rensesituasjoner.

Oppgaven er reservert Guro Mathisen

JPA: Førsteamanuensis Jens-Petter Andreassen

JPA-1: Separasjon av ukurante krystallblandinger gjennom tetthetsforskjeller

Dyno Nobel ASA, Forsvarsprodukter produserer forskjellige typer av høyeksplosiver ved sitt fabrikkanlegg i Sætre på Hurumlandet, ca 45 km syd for Oslo. Hovedproduktene er RDX (1,3,5-trinitro-1,3,5-triazasykloheksan) og HMX (1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetraazasyklooktan) som er krystallinske forbindelser. HMX leveres med en RDX andel under 2 % mens RDX normalt leveres med 0-10 % HMX innhold.

Prosessene for å lage HMX eller RDX foregår i det samme produksjonsanlegget med de samme råvarene. I prosessene vil man derfor alltid få ukurante blandinger med RDX og HMX. Det er en stor utfordring å skille disse relativt like forbindelsene da de begge er krystallinske og har mange like egenskaper. Både med tanke på økonomi og miljø er det mye å hente hvis man klarer å skille HMX og RDX i disse ukurante blandinger. Løselighetsforskjeller for krystallene i egnede løsemidler, kompleksing av molekyler og tetthetsforskjeller mellom krystallene ser ut til å være de mest effektive metodene for å skille RDX og HMX enten som molekyler eller som krystaller. Løselighetsforskjellen er den eneste egenskapen som blir benyttet for å skille disse i stor skala i dag.

Ved tilsats av diverse salter kan tettheten til en vandig løsning justeres slik at den ligger mellom tettheten til RDX og HMX og kan på denne måten skille krystallene fra hverandre ved henholdsvis oppdrift og sedimentering. Vi ønsker å se på muligheten for å benytte dette i fullskala enten som en batch-produksjon eller som en kontinuerlig prosess. Utfordringen ligger innledningsvis i å beregne oppholdstider i en tank utifra krystallstørrelser og sedimentasjonshastigheter i en løsning med gitt tetthet og dermed kapasitet i en batch eller en kontinuerlig prosess. Utstyret må så dimensjoneres i forhold til dette. Den valgte prosessruten skal gjennomføres i pilot skala, i utgangspunktet ca 10 literskala. I tillegg er en forprosjektering av et fullskala anlegg også ønskelig. Renhet på produkt, utbytte, økonomi, logistikk og kapasitet er viktige responsfaktorer i dette arbeidet.

Det eksperimentelle arbeidet vil i sin helhet måtte bli utført lokalt ved Dyno Nobels fabrikkanlegg. Forsøk vil bli utført i vårt velutstyrte pilot anlegg i skala fra 10 liter til 150 liter. Kandidaten vil få god hjelp til karakterisering av produktene samt at vi kan tilby god assistanse både med tanke på faglig veiledning og utstyrsproblematikk. Diplomkandidaten vil få dekket reiseutgifter for nødvendige besøk til NTNU-Trondheim i løpet av den fastsatte arbeidsperioden.

For ytterligere opplysninger om oppgaven kan dere gjerne ta kontakt med Forsker Jørn Digre Kristiansen på telefon 32 27 86 21 eller e-post: jorn.digre.kristiansen@eu.dynonobel.com

JPA-2: Separasjon av HMX og RDX ved hjelp av krystallisering.

Dyno Nobel ASA, Forsvarsprodukter produserer forskjellige typer av høyeksplosiver ved sitt fabrikkanlegg i Sætre på Hurumlandet, ca 45 km syd for Oslo. Hovedproduktene er RDX (1,3,5-trinitro-1,3,5-triazasykloheksan) og HMX (1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetraazasyklooktan) som er

krystallinske forbindelser. HMX leveres med en RDX andel under 2% mens RDX normalt leveres med 0-10 % HMX innhold.

Prosessene for å lage HMX eller RDX foregår i det samme produksjonsanlegget med de samme råvarene. I prosessene vil man derfor alltid få ukurante blandinger med RDX og HMX. Det er en stor utfordring å skille disse relativt like forbindelsene da de begge er krystallinske og har mange like egenskaper. Både med tanke på økonomi og miljø er det mye å hente hvis man klarer å skille HMX og RDX i disse ukurante blandinger. Det vurderes flere alternative metoder for å skille disse. Dette går på å utnytte løselighetsforskjeller for krystallene i forskjellige løsemidler, kompleksing av molekylene og tetthetsforskjeller mellom krystallene. Denne oppgaven går på å utvikle dagens krystalliseringsmetoder både med tanke på separasjon og generelt med tanke på andre salgbare produkter.

Ved hjelp av forskjellige prosessbetingelser under krystallisering styrer vi størrelsesfordelingen på produktene. Vi lager i dag produkter der den gjennomsnittlige krystallstørrelsen varierer fra ca 20 μm til 1000 μm ved forskjellige krystalliserings teknikker. Denne oppgaven går i hovedsak på å videreutvikle og undersøke teknikk for å bruke pokedkrystaller i krystallisering av HMX og RDX i sykloheksanon. Ved hjelp av de riktige teknikkene kan man styre krystallstørrelsesfordelingen og trolig styre størrelsen på HMX i forhold til RDX. Konkret blir det å gjøre undersøkelser i litteratur, vurdere forskjellig egnet måleutstyr for å kontrollere krystallveksten, og en stor grad av eksperimentelt arbeid for å utvikle en bra teknikk. Når man får en egnet størrelsesfordeling kan man separere HMX og RDX ved for eksempel bruk av en hydroyklon.

Det eksperimentelle arbeidet vil i sin helhet måtte bli utført lokalt ved Dyno Nobels fabrikanlegg. Forsøk vil bli utført i vårt velutstyrte pilot anlegg i skala fra 10 liter til 150 liter og en del vil foregå direkte i fabrikk i 20 000 liter skala. Kandidaten vil få god hjelp til karakterisering av produktene samt at vi kan tilby god assistanse både med tanke på faglig veiledning og utstyrsproblematikk. Diplomkandidaten vil få dekket reiseutgifter for nødvendige besøk til NTNU-Trondheim i løpet av den fastsatte arbeidsperioden.

For ytterligere opplysninger om oppgaven kan dere gjerne ta kontakt med Terje Halvorsen på telefon 32 27 86 32/ 900 29 911 eller e-post: terje.halvorsen@eu.dynonobel.com

JPA-3: Fremstilling av nano-partikulære krystaller av barium- og blytitanat.

Oksidmaterialer som BaTiO_3 og PbTiO_3 er viktig for fremstilling av dielektriske komponenter til elektronikkindustrien. Fremstillingsmetoden for bariumtitanat-pulver har tradisjonelt vært en kalsinerings-reaksjon mellom bariumkarbonat/oksid og titandioksid ved temperaturer over 1000°C. Dette er en energikrevende prosess som foruten nedre begrensninger i partikkelstørrelse, også resulterer i krystaller med heterogen form og størrelse. Litteratur fra det siste tiåret viser at det er mulig å produsere bariumtitanat som en veldefinert populasjon av polykrystallinske og kuleformede partikler av sub-mikron størrelse, ved reaksjonskrystallisering mellom vandige løsninger av BaCl_2 og TiCl_4 ved temperaturer under 100°C.

En innledende studie har vist at en slik enkel fellingsteknikk er en tilfredstillende metode for å fremstille sfæriske partikler av bariumtitanat med diametere i området 50-200 nm. I følge litteraturen dannes disse runde partiklene ved agglomerering av krystaller av størrelsesorden <10 nm, men de foreløpige resultatene viser at partiklene like gjerne er et resultat av sfærlittisk vekst. Riktig mekanismeforståelse vil være avgjørende for å kontrollere den endelige partikkelstørrelsen og vil derfor bli et hovedtema for denne hovedoppgaven.

Arbeidet vil ta utgangspunkt i en slik lavtemperatur fellingsreaksjon for å fremstille partikler av både bariumtitanat og blytitanat. Effekten av startkonsentrasjonen, temperatur og tilsatsstoffer skal studeres. Her vil det også inngå kartlegging av en tidlig amorf fase i fellingen og betydningen av denne for størrelsen til partiklene.

Som et ledd i mekanismeforståelsen vil det bli innledet et samarbeid med institutt for materialteknologi hvor de samme oksidmineralene studeres med henblikk på å lage nanopartikler og 1-dimensjonale nanokrystaller ved bruk andre beslektede synteseruter.

Oppgaven er reservert Bjørn Arild Bysheim

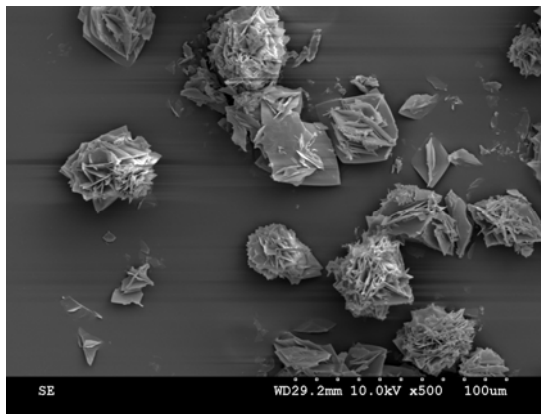
DMS: Professor II Dick Malthe-Sørenssen

I produksjonen av basis substanser til kontrastmidler har Amersham Health/GE-Healthcare en omfattende bruk av krystallisering som en separasjon og rensemetode. For å kunne styre disse prosessene optimalt (kvalitetsmessig og økonomisk) er det viktig med en grunnleggende forståelse av krystalliseringsprosessene og hvilke parametre som er med på å kontrollere sluttresultatet. Et viktig mål er å stabilisere og øke reproduserbarheten i fellingsreaksjoner. Amersham Health er nå en del av General Electric Healthcare et verdensomspennende selskap innen medisinsk diagnostikk.

**DMS-1: Primær kjernedannelse og amorf utfelling i en reaksjonskrystallisasjon -
virkning av overmetning og temperatur på dannelsen av amorf fase,
kjernedannelse og krystallform.**

En ønsker å forstå følgende forhold ved en reaksjonskrystallisering:

1. Hvordan den primære kjernedannelsen påvirkes av:
 - Amorf utfelling og overgang til krystallinsk form
 - Graden av overmetning og temperatur
 - Løsningens sammensetning av salter og løsningsmidler.
2. Hvordan krystallenes form og størrelse påvirkes av kjernedannelsen:
 - Studere krystallenes form og partikkelstørrelsesfordelingen ved bruk av partikkeltellerutstyr og mikroskop
 - Krystallinitet ved røntgen diffraksjon



Oppgaven vil bli gjennomført ved Institutt for kjemisk prosess teknologi i samarbeid med Amersham Health. Det vil være aktuelt å gjennomføre noen forsøk med aktuelle prosessløsninger ved fabrikk til Amersham Health.

Medveiledere: Jens Petter Andreassen, Kontaktperson Amersham Health: Hanne Johnsen

Papir og fiberteknologi

ØWG **Professor Øyvind Weiby Gregersen**

ØWG-1: Absorpsjonshastighet til trykkfarge i SC-papir som inneholder kalsiumkarbonat

Bakgrunn

Det er ønskelig å bruke kalsiumkarbonat som fyllstoff i SC-papir fordi kalsiumkarbonat har bedre optiske egenskaper enn leire (clay) som vanligvis brukes som fyllstoff. Et problem med kalsiumkarbonat er at absorpsjonen av trykkfarge inn i papiret øker. Dette gjør at trykkeriene kan komme til å måtte bruke mer farge.

Oppgaven

Oppgaven går ut på å undersøke om årsaken til den høyere absorpsjonen av trykkfarge er en mer åpen porestruktur i arket, eller om det er overflatekjemiske forhold som endres, ved bruk av kalsiumkarbonat, slik at absorpsjonen går raskere.

Metoder

Oppgaven vil inneholde arkproduksjon og målinger av oljeabsorpsjon, tolueninntrengningshastighet og eventuelt inntrengningsdybde til trykkfargepigmenter. Oppgaven vil også inneholde mikroskopering (SEM) og bildeanalyse samt overflatekjemiske målinger. Det eksperimentelle arbeidet vil i hovedsak foregå ved Norske Skog Saugbrugs, men en del oppgaver, særlig knyttet til mikroskopering, vil foregå ved NTNU og PFI.

Veileder er Professor Øyvind Gregersen

Medveileder ved NTNU er Stipendiat Øyvind Eriksen

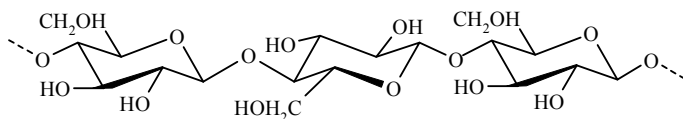
Medveileder ved Saugbrugs er Gudmund Jenssen (Norske Skog R&D)

Oppgave er reservert Cecilie Jonassen

SM **Førsteamanuensis Størker Moe**

SM-1: Funksjonalisering av mikro- og nanopartikler fra cellulose

Cellulose er den mest utbredte biopolymeren i verden, og er det viktigste strukturelementet i høyere planter. Cellulose er en kjede av D-anhydroglukopyranose-enheter bundet sammen i β -1,4-posisjonen (figur 1).



Figur 1: β -D-glukopyranose-enheter i cellulose.

I naturen danner cellulose lange, krystallignende fibre ved at 20-100 cellulosekjeder pakkes tett sammen til en såkalt mikrofibrill (MFC). Disse mikrofibrillene har diameter i størrelsesorden 5-50 nm, og lengder opp til flere mikrometer. Dette gir svært store lengde-bredde forhold, i tillegg til et stort spesifikt overflateareal. På grunn av disse egenskapene, har forskere i den senere tid fattet interesse for cellulose microfibriller som utgangsmateriale for nye biobaserte materialer. Ved å kjemisk modifisere overflaten på cellulose MFC, vil man kunne fremstille nye cellulosederivat med helt unike egenskaper.

Hovedoppgaven vil gå ut på å kjemisk koble ulike funksjonaliteter til overflaten på cellulose MFC, for så å studere de reologiske og fysikalske egenskapene til den modifiserte forbindelsen, det vil si

måle viskositet, overflatespenning og kontaktvinkler. Videre vil det være aktuelt med analyser ved hjelp av elektronmikroskopi (SEM), samt kjemisk karakterisasjon ved FT-IR og eventuelt NMR.

Et eksempel kan være å studere reaksjonen mellom cellulose mikrofibriller og alkyl dimetylklorosilaner (Gousse *et al.*, *Polymer*, **45**, 1569 (2004)):

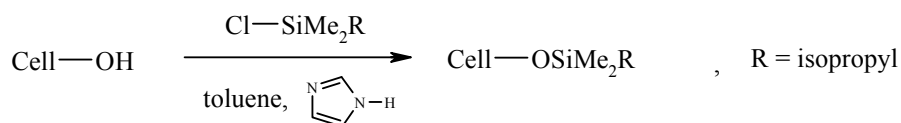


Figure 2: Silanisering av hydroksylfunksjon på cellulose.

Andre muligheter vil være kobling av ulike antimikrobielle forbindelser til overflaten av cellulose MFC, for deretter og måle den antibakterielle aktiviteten til det resulterende materialet.

Hovedoppgaven vil inngå som en del av et større samarbeidsprosjekt, "Development of new biobased materials" (2004-2006), mellom NTNU (Ugelstadlaboratoriet/ treforedlingsgruppen), PFI og Sintef (2 grupper innen materialer og kjemi).

Arbeidet vil foregå ved PFI.

Veileder: Stipendiat Martin Andresen

SM-2: Innvirkning av harpikskomponenter på arkegenskapene til mekanisk papirmassefiber

Sesongvariasjoner i kvaliteten på mekanisk masse er et velkjent fenomen blant fabrikker som lager treholdig trykkipapir. Spesielt slitstyrke og lyshet varierer syklisk i løpet av året, og de grunnleggende årsakene til dette er fremdeles ikke fullt kjent.

En hypotese for årsaken til disse sesongvariasjonene er endringer i mengde og/eller sammensetning av ekstraktivstoffer ("harpiks") i veden over året, enten på grunn av biologiske variasjoner eller på grunn av endringer i graden av enzymatisk og oksidativ nedbrytning av ekstraktivstoffene etter felling. Som en del av fellesprosjektet "Norsk trevirke som råstoff: Verdiskapingspotensial og industrielle muligheter" har det blitt påvist en samvariasjon mellom sammensetningen av ekstraktivstoffene i massen og egenskapene til massen. For å undersøke om dette er et reelt årsaks-/virkningsforhold, eller om det er en tilfeldig samvariasjon skal det utføres forsøk med kontrollert tilsetning av ulike harpikskomponenter til massen.

Arbeidet vil gå ut på framstilling av naturlige (modifiserte) eller syntetiske ekstraktivstoffblandinger og tilsette dette til papirmassen før det lages ark av den samme massen. Arkene vil så bli analysert for de mest relevante egenskapene (styrke, styrkeegenskaper og eventuelt friksjonskoeffisient), og eventuelle endringer i disse egenskapene vil bli analysert i lys av mengde og sammensetning av tilsatte ekstraktivkomponenter.

Arbeidet vil foregå i PFI-bygget.

Veileder: Stipendiat Hilde Lyngstad