**Χημεία Ατελειών και Συμπεριφορά Περοβσκιτών σε Διεργασίες Χημικής Ανάδρασης**

**Λ. Ναλμπαντιάν1, Α. Εύδου1, Χ. Ματσούκα1 και Β. Ζασπάλης1,2**

*1Εθνικό Κέντρο Έρευνας και Τεχνολογικής Ανάπτυξης, Ινστιτούτο Διεργασιών και Ενεργειακών Πόρων, Εργαστήριο Ανόργανων Υλικών*

*2Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Σχολή Πολυτεχνική, Τμήμα Χημικών Μηχανικών, Εργαστήριο Τεχνολογίας των Υλικών*

##### Τα υλικά της δομής του περοβσκίτη παρουσιάζουν σημαντικό ενδιαφέρον ως φορείς οξυγόνου σε διεργασίες χημικής ανάδρασης (Chemical Looping). Μεταξύ των πλεονεκτημάτων συγκαταλέγονται η σχετικά μεγάλη ευκινησία των ατόμων του οξυγόνου και η ικανότητά τους να παρουσιάζουν δομική ευστάθεια σε μεγάλο εύρος χημικών συστάσεων και στοιχειομετρικών αποκλίσεων οι οποίες συνοδεύονται από μια ποικιλομορφία σημειακών ατελειών. Παρέχεται έτσι η δυνατότητα χειρισμού των χημικών αντιδράσεων είτε προς την κατεύθυνση της ολικής (Chemical Looping Combustion) είτε προς την κατεύθυνση της μερικής (Chemical Looping Reforming) καύσης. Τα παραπάνω πλεονεκτήματα αντισταθμίζουν τις σχετικά χαμηλές ικανότητες μεταφοράς οξυγόνου που παρουσιάζουν σε σχέση με τα συμβατικά οξείδια στα οποία στηρίχθηκε αρχικά η ανάπτυξη των διεργασιών χημικής ανάδρασης.

##### Στην παρούσα εργασία επιχειρείται, μέσω πειραμάτων χημικής αντίδρασης με ταυτόχρονη θερμοσταθμική ανάλυση, η μελέτη του μηχανισμού (ολικής ή μερικής) καύσης του Mεθανίου σε υλικά της δομής του περοβσκίτη με γενικό χημικό τύπο La1-xMxMnO3 (M=Sr, Ca). Aπό τα αποτελέσματα προκύπτει πως η συνολική ικανότητα μεταφοράς οξυγόνου μπορεί να θεωρηθεί πως απαρτίζεται από τρία επί μέρους τμήματα. Ένα τμήμα συμμετέχει στην αντίδραση (ολικής) καύσης του μεθανίου μέσω του μηχανισμού αποδέσμευσης (Chemical Looping with Oxygen Uncoupling), ένα δεύτερο τμήμα συμμετέχει στην αντίδραση ολικής καύσης και ένα τρίτο τμήμα στην αντίδραση μερικής καύσης. Η σχετική συνδρομή κάθε τμήματος στην ολική ικανότητα μεταφοράς οξυγόνου (κατά συνέπεια και η εκλεκτικότητα της αντίδρασης σε διοξείδιο ή μονοξείδιο του άνθρακα) εξαρτάται έντονα τόσο από τη μερική πίεση του οξυγόνου κατά την οξείδωση του περοβσκίτη όσο και από την περιεκτικότητα σε δισθενές μέταλλο Μ. Έχουν δε άμεση σχέση με τις συγκεντρώσεις σημειακών ατελειών στη δομή των υλικών. Επιπρόσθετα, τα υλικά με πρόσμιξη SrO ή CaO παρουσιάζουν την ίδια χημεία ατελειών με αποτέλεσμα να παρουσιάζουν την ίδια ποιοτική συμπεριφορά σε διεργασίες χημικής ανάδρασης και οι μεταξύ τους διαφοροποιήσεις να είναι μόνο ποσοτικές.