Д15. Адсорбция және кеуекті материалдар саласындағы заманауи үрдістер мен болашағы

Академиялық дәріс

Жаңа материалдар • Сандық жобалау • Тұрақты технологиялар

Дәрістің мақсаты мен мазмұны

Мақсаты

Адсорбция және кеуекті құрылым саласындағы жаңа ғылыми бағыттарды талдау; материал–құрылым–қасиет–процесс байланысын және технологиялық енгізудің шектеулерін бағалау.

1. Жаңа материалдар

MOF, COF, көміртек, композиттер

2. Жобалау

Функционалдандыру, AI/ML, моделдеу

3. Қолдану

CO_2, H_2, су, бөлу процестері

4. Инжиниринг

Қалыптау, колонна, регенерация

5. Болашақ

Баға, ұзақмерзімділік, экологиялық әсер

Оқу нәтижелері

Білу

MOF, COF, көміртек және иерархиялық кеуекті жүйелердің негізгі ерекшеліктерін сипаттау.

Талдау

Сыйымдылық, селективтілік, кинетика және циклдік тұрақтылықты бірлесіп бағалау.

Қолдану

Адсорбентті нақты технологиялық мақсатқа таңдап, зерттеу жоспарын ұсыну.

Неге бұл сала қарқынды дамуда?

Экология

Парниктік газдарды ұстау, судағы микроластағыштар мен PFAS-ты жою қажеттілігі.

Энергетика

Газдарды бөлу мен сақтау, энергия тиімділігін жоғарылату, төмен энергиялы регенерация.

Материалтану

Кеуек өлшемі мен беттік химияны молекулалық деңгейде реттеу мүмкіндігі.

Дәстүрлі және жаңа адсорбенттер

Қалыптасқан материалдар

- Активтелген көмір: қолжетімділік және регенерация тәжірибесі.
- Цеолиттер: кристалдық микрокеуек және селективтілік.
- Силикагель: полярлы беттік топтар, кептіру.

Жаңа платформалар

- MOF: металл түйіндері мен органикалық линкерлер.
- COF: органикалық коваленттік қаңқа.
- Графен туындылары және кеуекті полимерлер.
- Көпкомпонентті гибридтер.

MOF материалдарының жаңа бағыттары

Реттелетін құрылым

Линкер, металл түйіні, ашық металл орталығы, ақаулар арқылы адсорбциялық орта құру.

Таңдамалы ұстау

CO_2/N_2, CO_2/CH_4, су буы және басқа газдарды бөлуге бейімдеу.

Негізгі шектеу

Су мен қоспаларға төзімділік, өндірістік синтез, таблеткалау және өмірлік цикл.

COF және кеуекті органикалық полимерлер

COF

Жеңіл элементтерден тұратын периодтық кеуекті құрылым; функционалдық топтарды жобалауға қолайлы.

Кеуекті полимерлер

Торланған құрылым, химиялық тұрақтылық пен өңделу қасиетін мақсатты өзгерту.

Қолданылуы

Су тазарту, газдарды бөлу, селективті сорбция, гибридті адсорбция–катализ жүйелері.

Көміртекті материалдардың дамуы

Құрылымды мақсатты басқару

- Биомассадан алынған активтелген көмір.
- Микро-/мезокеуектердің иерархиясы.
- N, S, O функционалдық топтарымен модификация.
- Графен/көміртекті нанотүтікше композиттері.

Маңызды әдістемелік ескерту

Жоғары S_BET — жоғары жұмыс сыйымдылығының кепілі емес.

Сулы ортада pH, иондық күш, бәсекелес иондар, беттік заряд және масса тасымалы шешуші болуы мүмкін.

Иерархиялық кеуектер және масса тасымалы

IUPAC өлшемдік шектері; нақты үлгіде өзара байланысқан кеуек торы маңызды

Микрокеуек (< 2 нм)

Көптеген жүйелерде сорбция энергиясы мен сыйымдылық үшін маңызды.

Мезокеуек (2–50 нм)

Диффузиялық қолжетімділікті жақсартып, ірі молекулалардың тасымалын жеңілдетеді.

Макрокеуек (> 50 нм)

Сұйық/газ ағынының таралуы, қысым түсуі мен түйір ішіндегі қолжетімділікке ықпал етеді.

Функционалдандыру және селективтілік

Аминді топтар

CO_2-мен тиімді әрекеттесуді арттыруы мүмкін; тотығу және ылғал әсерін бағалау қажет.

Қышқыл/негіздік топтар

Металл иондарымен координация, протондану және электростатикалық әрекеттесу.

Гидрофобтық басқару

Ылғалдың бәсекелес адсорбциясын азайтуы мүмкін, бірақ нысаналы молекулаға аффинділік сақталуы тиіс.

Тиімді адсорбентті қалай бағалаймыз?

Сыйымдылық жалғыз критерий емес

Нақты технологияға арналған бағалау өлшемдері:

- Жұмыс сыйымдылығы: адсорбция және регенерация жағдайларындағы айырма.
- Селективтілік: қоспа компоненттерінің бір-біріне қатысты сорбциясы.
- Кинетика: тепе-теңдікке жету уақыты және ішкі диффузия.
- Қайта қолдану: циклдердегі сыйымдылықтың сақталуы.
- Құн, қысым түсуі, механикалық және химиялық беріктік.

$$q_{work} = q_{ads} - q_{des}$$

Жұмыс жағдайына тәуелді изотермалар

Теориялық/иллюстрациялық модель — нақты өлшенген эксперименттік деректер емес

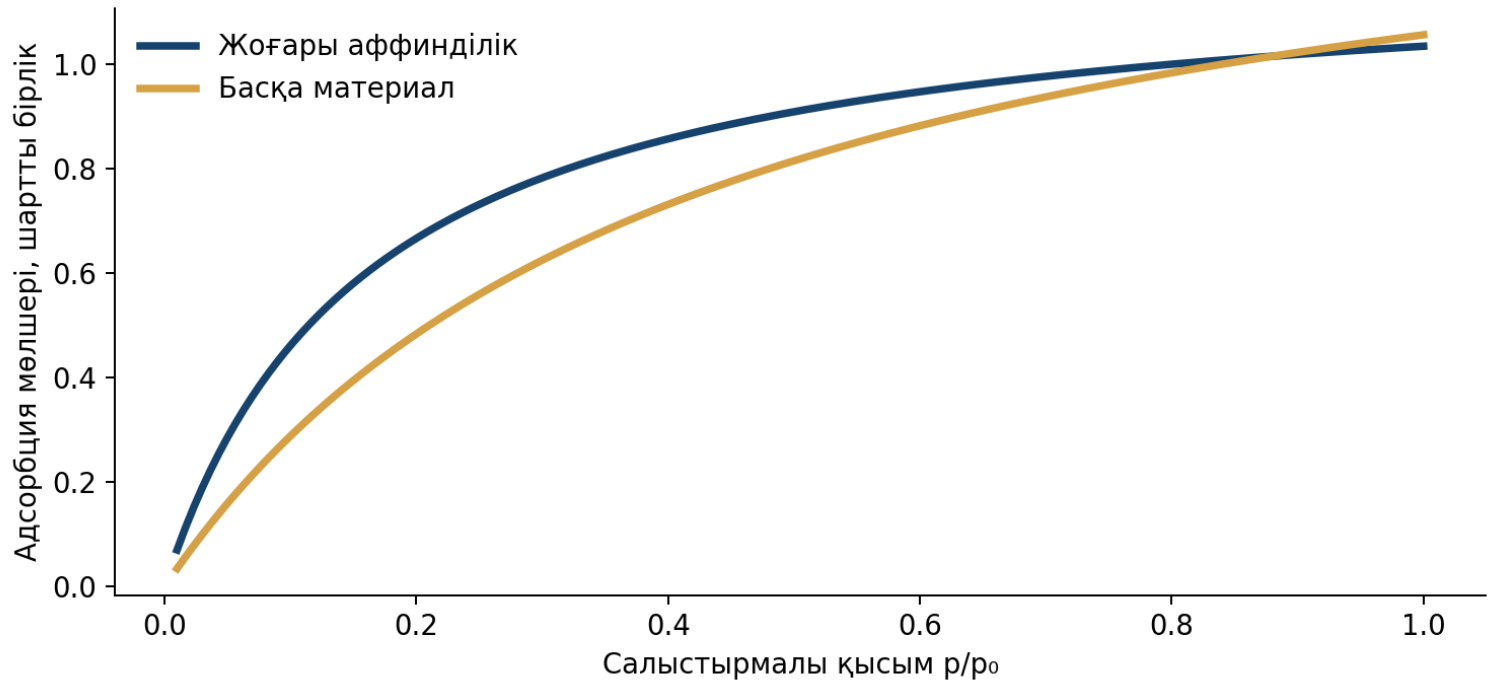


График нені көрсетеді?

Сыйымдылық қана емес, төмен қысымдағы аффинділік те маңызды.

Нақты материалды салыстырғанда бірдей температура, қысым және газ құрамы қажет.

Газдарды бөлу: CO_2 ұстау

Негізгі көздер

Түтін газынан CO_2 бөлу, табиғи газды тазарту, ауадан тікелей CO_2 алу (DAC).

Негізгі материалдар

Аминделген тасымалдағыштар, цеолиттер, MOF, кеуекті көмір және гибридтер.

Шектеулер

Ылғал, O_2, төмен CO_2 парциалдық қысымы, энергия шығыны, циклдік деградация.

DAC: ауадан тікелей CO_2 ұстау

Процесс логикасы

1. Ауаны адсорбентпен жанастыру.
2. CO_2-ні селективті байланыстыру.
3. Температура/вакуум/басқа әсермен регенерациялау.
4. CO_2-ні концентрлеу, сақтау не пайдалану.

2026 жылғы зерттеулердің басымдығы

- Ұзақ циклдік тұрақтылық.
- Регенерацияның энергия шығынын азайту.
- Ылғал мен оттегі әсерін бағалау.
- Материал мен процесс параметрлерін бірге оңтайландыру.

Регенерацияның заманауи тәсілдері

TSA / TVSA

Температуралық немесе температура–вакуумдық ауыстыру; жылу кірісі мен цикл уақыты маңызды.

PSA / VSA

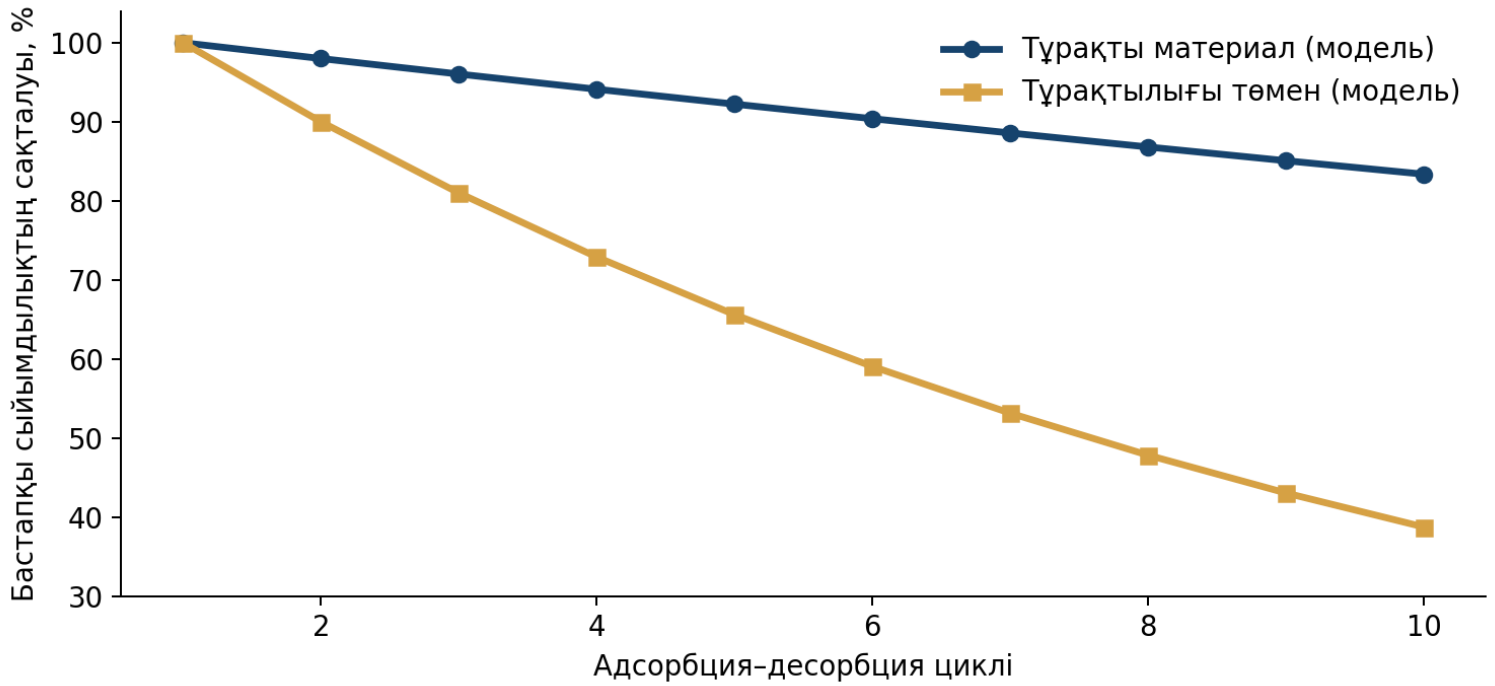
Қысым/вакуум арқылы десорбция; энергия мен бөлінетін газ тазалығының компромисі.

Жаңа тәсілдер

Электрлік қыздыру, ылғалға жауап беретін жүйелер және гибридті регенерация процестері.

Циклдік тұрақтылықтың рөлі

Теориялық/иллюстрациялық модель — нақты өлшенген эксперименттік деректер емес



Негізгі идея

Бастапқы сыйымдылығы жоғары материал тез деградацияланса, ұзақмерзімді процесте тиімсіз болуы мүмкін.

Жарияланған жұмыс нәтижесін цикл саны және сынау шарттарымен бірге талдау керек.

Суды тазартудың жаңа бағыттары

Микроластағыштар

Дәрілік заттар, бояғыштар, пестицидтер және басқа аз концентрациялы ластағыштарды ұстау.

Иондар және PFAS

Бәсекелес сорбция, молекула өлшемі, функционалдық топтар және регенерация маңызды.

Кешенді жүйелер

Адсорбцияны мембранамен, фотокатализбен немесе басқа тазарту сатыларымен біріктіру.

Гибридті материалдар және технологиялар

MOF@полимер

Материалды механикалық тұрақтандыру, мембраналарға енгізу және өңделуін жақсарту.

Көмір@MOF / цеолит@MOF

Селективті орталықтар мен тасымал жолдарын біріктіруге бағытталған архитектура.

Адсорбция + катализ

Ластағышты алдымен жинақтап, кейін ыдырататын немесе түрлендіретін интеграцияланған тәсіл.

Жасанды интеллект және молекулалық модельдеу

Жоғары өнімді скрининг

Құрылымдық дерекқорларда мыңдаған кандидаттың қасиеттерін есептік іріктеу.

Машиналық оқыту

Кеуек өлшемі, химиялық дескрипторлар және эксперименттік деректерден қасиетті болжау.

Валидация

Деректердің сапасы, модельдің қолданылу аймағы және тәуелсіз тәжірибелік тексеру қажет.

Материал–процесс бірлескен жобалау

Көпдеңгейлі тәсіл

Молекулалық деңгей → беткі байланысу энергиясы және селективтілік.

Кеуек деңгейі → диффузия, қолжетімді көлем және кинетика.

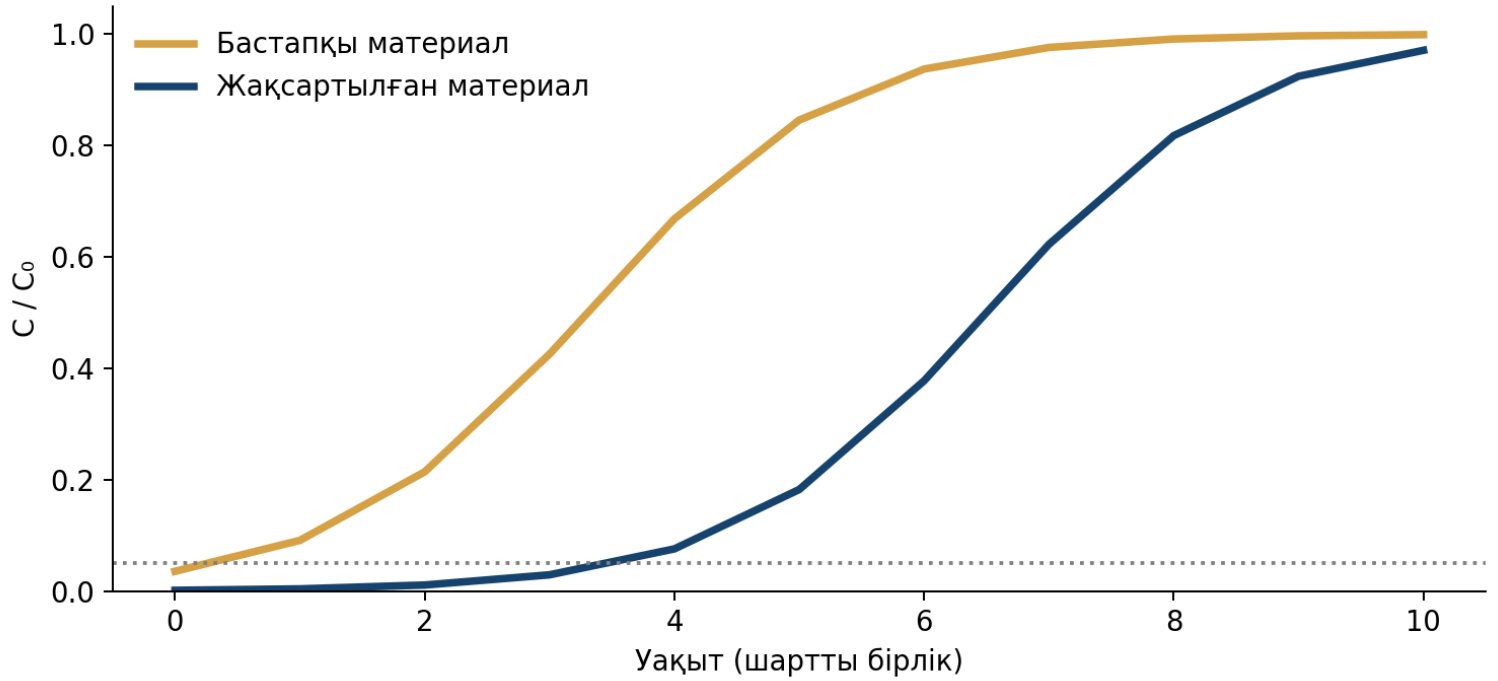
Түйір/монолит деңгейі → беріктік және қысым түсуі.

Құрылғы деңгейі → колонна, ағын режимі, регенерация энергиясы.

Жүйелік деңгей → құн, өмірлік цикл, қауіпсіздік және эмиссия.

Динамикалық сорбция және серпіліс қисығы

Теориялық/иллюстрациялық модель — нақты өлшенген эксперименттік деректер емес



Breakthrough талдауы

C/C_0–t қисығы сүзгі қызметінің нақты ұзақтығын көрсетеді.

Серпіліс уақыты ағынға, қабат биіктігіне, бастапқы құрамға және масса тасымалына тәуелді.

Зертханадан өнеркәсіпке дейін

Ұнтақтан түйірге

Байланыстырғыш, гранула, экструдат немесе монолит: қолжетімді кеуектер сақталуы қажет.

Нақты қоспа

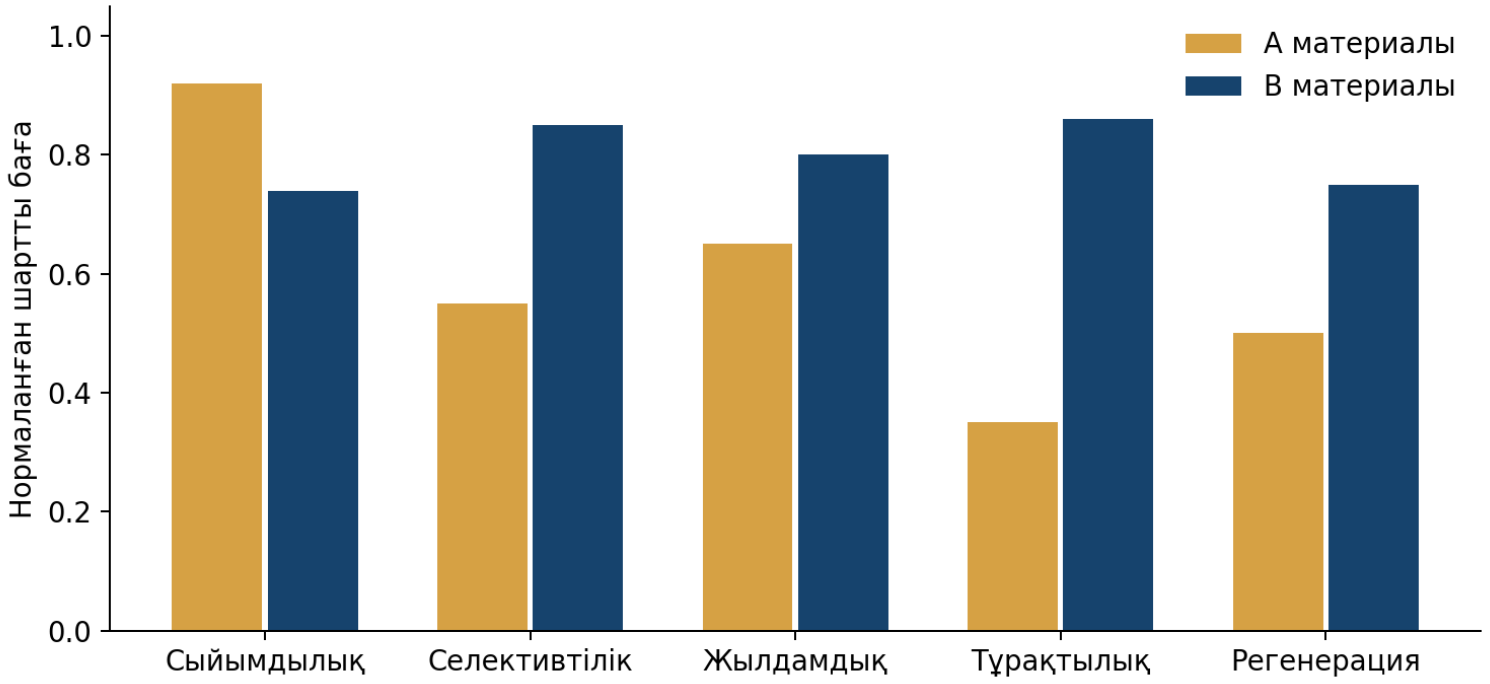
Су буы, тұз, шаң, органика, уытты компоненттер: селективтілік қайта тексеріледі.

Ұзақ сынақ

Жүздеген/мыңдаған циклге қарай бағалау, регенерация балансы және істен шығу механизмі.

Көпкритерийлі материал таңдау

Теориялық/иллюстрациялық модель — нақты өлшенген эксперименттік деректер емес



Таңдау принципі

Бұл диаграмма — оқытуға арналған шартты көрсеткіштер.

Бір мақсатта A, басқа мақсатта B материалы тиімді болуы мүмкін; салмақтар технологияға тәуелді.

Экономикалық және экологиялық бағалау

Технико-экономикалық бағалау (TEA)

- Материал бағасы және синтез шығымы.
- Қондырғы өнімділігі.
- Регенерация энергиясы.
- Сорбент ауыстыру жиілігі.
- Қалдықтарды басқару.

Өмірлік циклді бағалау (LCA)

- Шикізат пен еріткіш іздері.
- Синтез және кептіру энергиясы.
- Пайдалану кезеңіндегі эмиссия.
- Тасымалдау және кәдеге жарату.
- Функционалдық бірлік арқылы салыстыру.

Ғылыми зерттеуде жиі кездесетін қателер

Әдістерді шатастыру

BET ауданы, микрокеуек көлемі және максимал сорбция сыйымдылығы — әртүрлі шамалар.

Тек R^2-ке сүйену

Изотерма/кинетика моделінің сәйкестігі механизмді өздігінен дәлелдемейді.

Зертханалық мәнді асыра бағалау

Таза суда/бір газда өлшенген нәтиже күрделі қоспада немесе колоннада міндетті сақталмайды.

Модельдік зерттеу тапсырмасы

Берілгендер (шартты)

A адсорбенті: q_ads = 3.4 ммоль/г; q_des = 0.9 ммоль/г.

B адсорбенті: q_ads = 3.0 ммоль/г; q_des = 0.3 ммоль/г.

1) q_work есептеңіз.

2) Неге q_ads бойынша ғана таңдау дұрыс емес?

Шешуі мен талдау

A: q_work = 3.4 − 0.9 = 2.5 ммоль/г.

B: q_work = 3.0 − 0.3 = 2.7 ммоль/г.

B жұмыс сыйымдылығы бойынша жоғары. Алайда регенерация энергиясы, кинетика және тұрақтылық бағаланбай түпкілікті таңдау жасалмайды.

Алдағы зерттеу бағыттары

Басым ғылыми міндеттер

- Ылғалға, температураға және агрессивті қоспаларға төзімді кеуекті материалдар.
- Мақсатты функционалданған адсорбенттер және иерархиялық кеуек архитектурасы.
- Жасанды интеллект пен тәжірибені біріктіретін ашық әрі валидацияланған деректер.
- Төмен энергиялы регенерация және материал–процесс бірлескен дизайны.
- Өндірістік синтез, қауіпсіздік, TEA/LCA және нақты ағындардағы ұзақ сынақтар.

Қорытынды

Дәрістің негізгі тұжырымдары

1. MOF, COF және гибридті материалдар кеуектер мен беттік химияны мақсатты реттеуге мүмкіндік береді.
2. Жаңа адсорбенттің құндылығы тек S_BET не q_max арқылы анықталмайды.
3. Селективтілік, кинетика, жұмыс сыйымдылығы және регенерация тұрақтылығы бірге бағаланады.
4. AI/ML тиімді іздеуге көмектеседі, бірақ тәжірибелік растауды алмастырмайды.
5. Болашақ табыс зертханалық қасиетті нақты технологиялық жүйеге көшіруге байланысты.

Бақылау сұрақтары

Материалтану

1. MOF пен COF-тың негізгі айырмашылығы қандай?
2. Иерархиялық кеуектер қандай артықшылық береді?

Жобалау

3. Адсорбент үшін жұмыс сыйымдылығы қалай анықталады?
4. AI/ML моделін қалай тексеру қажет?

Қолдану

5. DAC адсорбентінің тұрақтылығына қандай факторлар әсер етеді?
6. TEA және LCA не үшін керек?

Әдебиеттер және ғылыми дереккөздер (I)

Рецензияланған еңбектер

1. Thommes M. et al. Physisorption of gases, with special reference to evaluation of surface area and pore size distribution (IUPAC). Pure Appl. Chem. 2015. DOI: 10.1515/pac-2014-1117.

2. Fajal S. et al. MOFs, COFs and other porous framework materials for water purification. Chem. Soc. Rev. 2026;55:8498–8561. DOI: 10.1039/D6CS00594B.

3. Fakhraddinfakhriazar S. et al. Stability of Adsorbents for Direct Air Capture: Challenges and Perspectives. Energy Fuels. 2026;40:4930–4983. DOI: 10.1021/acs.energyfuels.5c05460.

4. Filahi I. et al. Solid physisorbent-based direct air capture: A regeneration-focused review. Chem. Eng. J. 2025;522:167384. DOI: 10.1016/j.cej.2025.167384.

Әдебиеттер және ғылыми дереккөздер (II)

Заманауи технологиялар және модельдеу

5. Metal-organic frameworks: Role of artificial intelligence and machine learning algorithms for efficient discovery, design, synthesis and prediction of CO_2 capture capacity. Sep. Purif. Technol. 2026;388:136737. DOI: 10.1016/j.seppur.2026.136737.

6. Advances in Metal–Organic Frameworks for High-Performance Direct Air Capture of CO_2. ACS Omega. 2026;11:41008–41040. DOI: 10.1021/acsomega.6c03606.

7. Zhao Z. et al. Hydrophobic metal–organic frameworks and membranes for enhanced carbon capture. Chem. Eng. J. 2025;526:170657. DOI: 10.1016/j.cej.2025.170657.

8. Güemes L. et al. Zeolite@metal-organic framework core–shell … for CO_2 adsorption. Chem. Eng. J. 2025;518:164314. DOI: 10.1016/j.cej.2025.164314.