

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИИ
РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК**

**ОТДЕЛЕНИЕ ХИМИИ И НАУК О МАТЕРИАЛАХ
НАУЧНЫЙ СОВЕТ РАН ПО ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ И ЭЛЕКТРОХИМИИ
им. А.Н. ФРУМКИНА РАН**



ООО «ЗЕЛИНСКИЙ ГРУПП»



**Всероссийский интернет-симпозиум
с международным участием,
посвященный 160-летию Н.Д. Зелинского**

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ПРОБЛЕМЫ АДсорбЦИИ И
ТЕХНОЛОГИИ НАНОПориСТых МАТЕРИАЛОВ**

**Материалы интернет-симпозиума
19 октября – 15 ноября 2020 года, Москва, Россия**

**Москва
2020**

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИИ
РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК**

**ОТДЕЛЕНИЕ ХИМИИ И НАУК О МАТЕРИАЛАХ
НАУЧНЫЙ СОВЕТ РАН ПО ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ И ЭЛЕКТРОХИМИИ
им. А.Н. ФРУМКИНА РАН**



ООО «ЗЕЛИНСКИЙ ГРУПП»



**Всероссийский интернет-симпозиум
с международным участием,
посвященный 160-летию Н.Д. Зелинского**

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ПРОБЛЕМЫ АДсорбЦИИ И
ТЕХНОЛОГИИ НАНОПОРИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ**

**Материалы интернет-симпозиума
19 октября – 15 ноября 2020 года, Москва, Россия**

**Москва
2020**

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ПРОБЛЕМЫ АДСОРБЦИИ И ТЕХНОЛОГИИ НАНОПОРИСТЫХ МАТЕРИАЛАХ

Материалы Всероссийского интернет-симпозиума с международным участием,
19 октября–15 ноября 2020 г., Москва, Россия

В сборнике представлены материалы Всероссийского интернет-симпозиума с международным участием «Физико-химические проблемы адсорбции и технологии нанопористых материалов», посвященного 160- летию со дня рождения выдающегося российского ученого Николая Дмитриевича Зелинского, внесшего громадный вклад в мировую науку, развитие промышленности и защиту человечества от неблагоприятных воздействий окружающей среды.

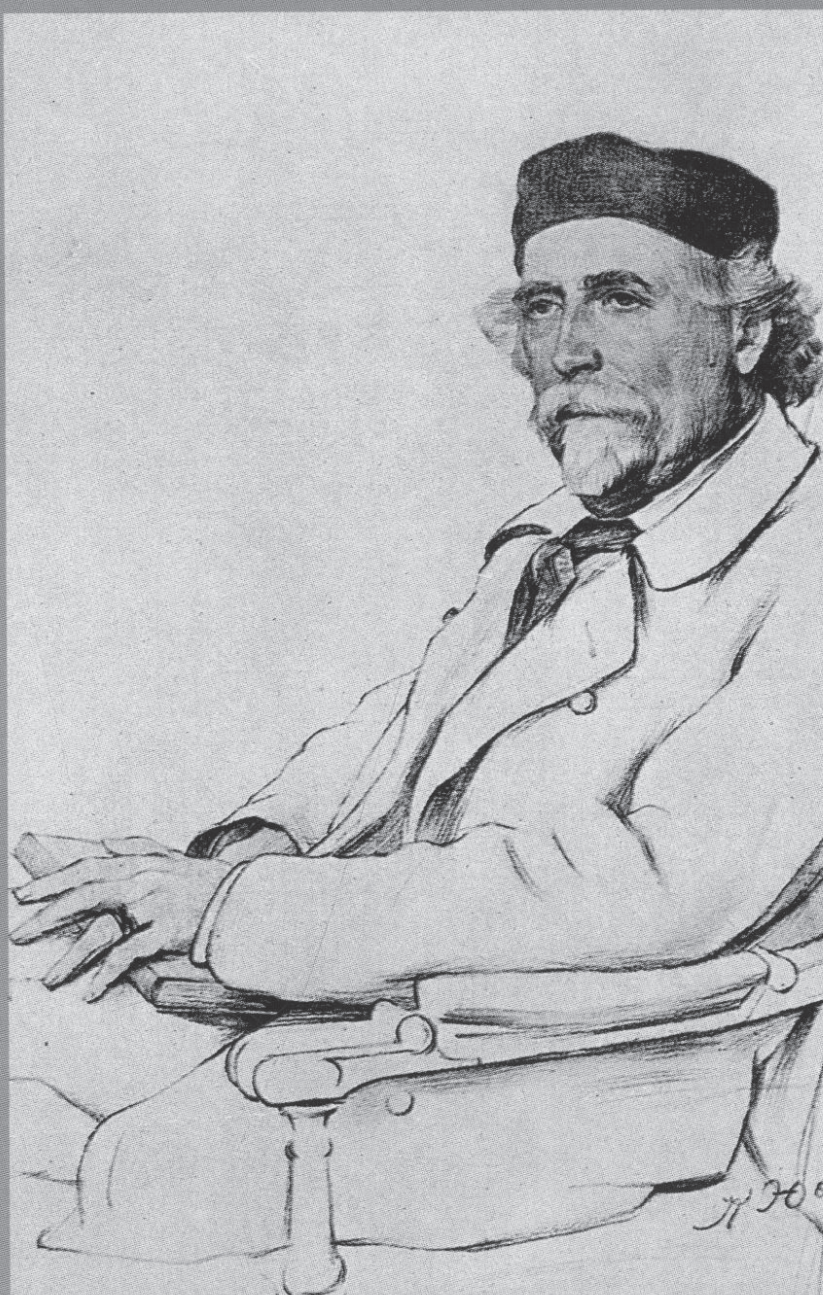
В сборнике представлены результаты научных исследований, отражающие последние достижения в области теории и практики адсорбционных процессов, проходившего 19 октября–15 ноября 2020 г. Обсуждаются актуальные проблемы адсорбции на поверхности и в нано- и микропорах твердых тел, кинетики и динамики адсорбции в различных условиях, неинертности и селективности адсорбентов. Рассмотрены задачи численного моделирования адсорбции в пористых материалах и на поверхности адсорбентов методами молекулярной динамики, Монте-Карло. Представлены результаты экспериментальных и теоретических исследований термодинамики адсорбции для энергетических адсорбционных систем, разработки феноменологических подходов и теоретических концепций адсорбции индивидуальных веществ и смесей, процессов самоорганизации и ассоциирования в адсорбате. Рассмотрены новые физико-химические подходы определения характеристик эффективности разделения смесей газов, адсорбционной деформации, особенностей молекулярной диффузии в порах и на поверхности.

В сборнике представлены результаты исследований в области синтеза и адсорбционных свойств новых углеродных и минеральных адсорбентов, силикагелей, металлоорганических каркасных структур, синтетических и природных композиционных и функциональных материалов, а также изучения их структуры и физико-химических свойств. Оценены возможности применения новых материалов в высокоэнергетических адсорбционных системах для газовой и нефтеперерабатывающей отраслей промышленности, молекулярно-ситового разделения газов, использования в медицине, а также в технологиях защиты окружающей среды. Широко представлены новые высокоактивные адсорбенты, полученные из отечественного сырья. Большой раздел сборника отведен на представление продукции и новых материалов спонсора и одного из организаторов Симпозиума – ООО «Зелинский групп»

Приведенные в материалах Симпозиума результаты представляют интерес для широкого круга химиков, физиков, инженеров, специалистов, работающих в научно-исследовательских институтах и вузах, аспирантов и студентов, чья деятельность непосредственно связана с исследованием адсорбционных процессов, синтезом адсорбентов и пористых функциональных материалов, разработкой новых адсорбционных технологий.

доктор физико-математических наук А.А. Фомкин,
кандидат химических наук Г.А. Петухова,
кандидат физико-математических наук Е.В. Хозина

© Федеральное Государственное бюджетное учреждение науки
Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН



Николай Зелинский
1861-1953

**SELECTIVE SORPTION OF ETHANE FROM NATURAL GAS BY CARBON
ADSORBENTS WITH A TAILORED POROUS NANOSTRUCTURE**

**Men'shchikov I.E.¹, Shkolin A.V.¹, Grekov D.I.², Gaidamavichute V.V.¹,
Pré P.², and Fomkin A.A.¹**

¹*M.M. Dubinin Laboratory of sorption processes,
A.N. Frumkin Institute of Physical Chemistry and Electrochemistry RAS
Leninsky pr. 31, building 4, Moscow, 119071, Russia*

²*IMT Atlantique, GEPEA UMR CNRS 6144, Nantes, F-44307, France,
e-mail: i.menshchikov@phyche.ac.ru*

The adsorption method is one of the most promising for creating energy-efficient systems for separating gases and vapors. At present, the separation of a methane/ethane mixture is one of the most demanded in practical terms, which is determined, on the one hand, by the relatively low ethane content in methane, and, on the other hand, by the wide application of ethane in industry, in particular in the large-scale polymer production. The problem of separating hydrocarbons contained in natural gas is of great current interest, especially for Russia, in connection with the new gas fields commissioning, as well as gas chemical production and gas-energy centers developed in Siberia, the Far East, and Yamal.

The key element of the adsorptive gas separation technology is a special adsorption material with high selectivity to one of the components of a binary gas mixture. In this case, the principle of separation of substances can proceed according to one of two mechanisms – kinetic or adsorption. The first mechanism is characterized by using so-called molecular sieve adsorbents, the second – adsorbents with a higher energy of adsorption of one of the components, usually with a lower concentration. Currently, from the point of view of the technical implementation of the separation process, pressure swing adsorption (PSA) units are the most common technique.

It is important to note that high requirements are currently imposed on gas separation plants, involving, in particular, an ability to flexibly vary operational conditions in wide ranges of temperatures and pressures at different stages of the processing chain of natural gas production and applications – from the bore-well (upstream) to the end consumer (downstream). In this regard, the development and optimization of the state parameters of the "*P-T-concentration-*

adsorbent" system for the most efficient gas separation process is an important and urgent scientific and practical task is of scientific and practical significance.

Nanoporous carbon adsorbents are the most promising materials for PSA units intended to separate a binary "methane-ethane" mixture, due to the possibility of varying the parameters of their structural and energy characteristics, the specific volume of micropores W_0 , the standard characteristic adsorption energy E_0 and the average effective radius micropore x_0 , in a wide range of values. In contrast to a new class of advanced materials such as metal-organic framework structures (MOF), carbon adsorbents have a chemically and mechanically stable structure resistant to moisture. The low-cost production of activated carbons makes them suitable for use in PSA units.

In this work, the structural and energy characteristics of carbon adsorbents with strongly different porous structures were studied. In accordance with the Dubinin theory of volume filling of micropores [1], the specific volume W_0 and the effective radius x_0 of micropores varied in the ranges 0.4–1.5 cm³/g and 0.40–0.80 nm, respectively. The absolute adsorption isotherms of the pure methane and ethane on the studied adsorbents were measured experimentally in the range of pressures from 0 to 100 bar and temperatures from 0 to plus 60°C. Based on the experimental data on adsorption and the Ideal Adsorption Solution Theory (IAST) [2], the adsorption equilibria of co-adsorption of the CH₄/C₂H₆ mixture with the composition of 95/5 vol.% were calculated, and the effective gas separation factors were determined.

It was shown that in separation systems operating at pressures below and near atmospheric, it is most advantageous to use adsorbents with ultra-micropores, while at high pressures over 10 bars, materials with high micropore width and volume are more efficient. The obtained results and optimization parameters can be used in designing the scaled pilot plants for the separation of the CH₄/C₂H₆ mixture under various operating conditions.

Acknowledgments:

*This work was carried out within the framework of the joint research program of the IPCE RAS and IMT Atlantique (Agreement on Joint Research from 13/10/2020) with financial support from the French Embassy in the Russian Federation within the framework of the “**I.I. Metchnikov scholarship program**”.*

References

1. M. M. Dubinin, in Progress in Surface Science and Membrane Science, Ed. D. A. Cadenhead, Academic Press, New York, 1975, 9, 1.
2. A. L. Myers and J. M. Prausnitz, AIChE J., 1965, 11, 121–127.