

Olefiny (węglowodory nienasycone, alkeny), a w szczególności etylen i propylen, są kluczowe w produkcji polimerów i materiałów z tworzyw sztucznych (tzw. plastików). Globalne zapotrzebowanie na olefiny przekracza obecnie 300 milionów ton rocznie, czyli około 35 kg na jednego człowieka. Proces produkcji olefin (kraking parowy nafty) jest jednym z najbardziej energochłonnych i wysokoemisyjnych procesów przemysłowych, opartym w dużej mierze o energię produkowaną ze źródeł nieodnawialnych. Dla przykładu, szacunkowe roczne zużycie energii do produkcji etylenu (3.5 EJ) jest zbliżone do całkowite zapotrzebowania energetycznego Kazachstanu (3.7 EJ). Ze względu na wielkotonażową produkcję, nawet pozornie niewielka poprawa efektywności energetyczne procesu może przynieść znaczną korzyść, i ułatwić osiągnięcie zerowych emisji netto w przemyśle.

Poza etylenem i propylenem, produkty krakingu parowego zawierają parafiny (węglowodory nasycone), inne olefiny oraz węglowodory aromatyczne. Ze względu na niską temperaturę wrzenia i bardzo zbliżone właściwości fizykochemiczne, olefiny o wysokiej czystości są oddzielane od ich parafinowych odpowiedników za pomocą skomplikowanego procesu destylacji kriogenicznej, prowadzonego w warunkach bardzo niskiej temperatury i wysokiego ciśnienia. Mimo technologicznej dojrzałości, destylacja kriogeniczna ma niską sprawność termodynamiczną, dlatego znalezienie alternatywnej, energooszczędnej, metody rozdzielania parafin i olefin mogłoby znacznie poprawić efektywność energetyczną procesu.

Adsorpcja, tj. akumulacja cząstek na powierzchni ciała stałego (adsorbentu), jako metoda rozdzielania, może być realną alternatywą, pod warunkiem, że dostępne będą wystarczająco selektywne adsorbenty. Adsorpcyjne techniki rozdzielania znalazły szerokie uznanie ze względu na niskie zapotrzebowanie energetyczne, prostotę w projektowaniu, obsłudze i utrzymaniu, oraz elastyczność procesu. Niestety, pomimo ponad 40 lat badań, nie zaproponowano jeszcze skutecznego rozwiązania, problemu separacji olefin, opierającego się na adsorpcji. Niemniej, poszukiwania nowych adsorbentów trwają, napędzane wysokim współczynnikiem zysku do ryzyka. W ostatnim czasie aerożele na bazie zredukowanego tlenku grafenu (rGO, ang. reduced graphene oxide), stały się obiektem zainteresowania, jako materiał mający szansę zrewolucjonizować przemysł, poprzez zintegrowanie unikalnych właściwości dwuwymiarowego grafenu z praktycznymi, trójwymiarowymi obiektami. Ich potencjał jest dostrzegany, także w adsorpcji.

Aerożele ze zredukowanego tlenku grafenu (rGOAs, ang. reduced graphene oxide aerogels) otrzymywane są metodą zol-żel z zawiesiny wodnej tlenku grafenu (GO, ang. graphene oxide) i suszenia sublimacyjnego, lub w nadkrytycznym CO₂. Struktura rGOA zbudowana jest z nakładających się na siebie, w sposób uporządkowany lub nie, płatków rGO. W wyniku tego powstaje hierarchiczna struktura mezoporowata o powierzchni właściwej od kilku do kilkuset metrów kwadratowych na gram. Właściwości fizykochemiczne powierzchni aerożeli są determinowane przez obecność znacznej ilości niesparowanych elektronów, defektów w heksagonalnej strukturze rGO, oraz grup funkcyjnych zawierających atomy tlenu. Z tego powodu, rGOA mogą oddziaływać ze związkami chemicznymi na różne sposoby, w tym poprzez oddziaływania van der Waalsa, hydrofobowe, elektrostatyczne czy wiązania wodorowe.

Na podstawie ograniczonej liczby informacji, na temat adsorpcji z fazy gazowej na rGOA, można domniemać, że ich struktura fizykochemiczna może sprzyjać adsorpcyjnemu rozdzielaniu parafin i olefin, z wykorzystaniem mechanizmu termodynamicznego (oddziaływania pomiędzy olefinami/parafinami i rGOA) i mechanizmu kinetycznego (różnice w rozmiarach cząsteczek parafin i olefin). Celem projektu jest uzyskanie odpowiedzi na następujące pytania:

1. Do jakiego stopnia rGOAs mogą adsorbować olefiny i parafiny, i jak jest to powiązane ze strukturą aerożeli?
2. Jak struktura olefin wpływa na adsorpcję na rGOAs?
3. Czy różnica w adsorpcji parafin i olefin jest na tyle duża żeby określić rGOA mianem adsorbentów selektywnych?
4. W jaki sposób ko-adsorpcja (adsorpcja konkurencyjna), w układach dwuskładnikowych, wpływa na sprawność rozdzielania?
5. Czy jest miejsce na poprawę selektywności rozdzielania rGOAs?

W ramach projektu zsyntezowane zostaną próbki aerożeli, których struktura zostanie szczegółowo przebadana za pomocą nowoczesnych technik analitycznych. Wyniki te, wraz z wynikami badań adsorpcji różnych olefin i parafin, wykorzystane zostaną do opisu mechanizmu adsorpcji. Innowacyjny charakter projektu kładzie nacisk na zapewnienie wysokiej jakości zebranych danych, które będą wykraczały poza obecny stan wiedzy i zapewnią podstawę przyszłych badań, zarówno w zakresie badań podstawowych, jak i aplikacyjnych. Wyniki projektu mają potencjał na wykorzystanie nie tylko w dziedzinie adsorpcji ale, także katalizy, materiałów polimerowych, czujników, czy materiałów do magazynowania energii.