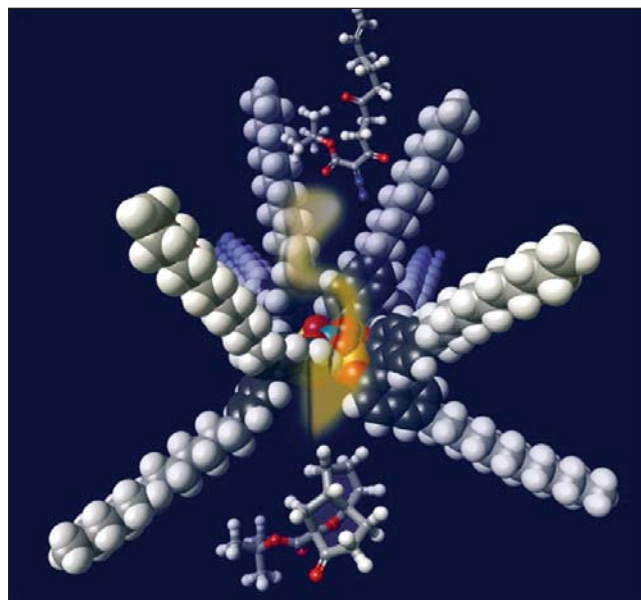


Каталитическая ХИМИЯ В 2020 ГОДУ

Доклад Vision 2020 Catalysis представляет план революционных преобразований в химической индустрии

Петр Степаненко



В 1996 году был запущен совместный проект крупнейших химических ассоциаций США, в котором представлен 25-летний план развития химической промышленности, получивший название «Technology Vision 2020: The Chemical Industry». В разработке концептуального проекта приняли участие Американское химическое общество (ACS), Ассоциация химических производителей (Chemical Manufacturers Association), Американский институт химических инженеров (American Institute of Chemical Engineers), Совет по химическим исследованиям (CCR) и Ассоциация производителей синтетических органических химикатов.

Для реализации плана были определены как необходимые четыре технические дисциплины, среди них — «новая химическая наука и инженерная технология». Было признано, что развитие химической науки является главным источником прогресса в химической индустрии, а также, поскольку проект разрабатывался американскими исследователями и был направлен на финан-

сирование американским конгрессом, — важнейшим фактором сохранения и повышения конкурентоспособности химической индустрии США. Химический синтез назвали одной из трех привилегированных областей химической науки, которые нуждаются в долгосрочных инвестициях в сферу исследований и разработок.

На совещании группы исследователей был разработан предварительный список важнейших потребностей и задач, которые имеют значение для всех систем катализа. Список оценивался 48 экспертами по катализу, которые представляли промышленность, научные и правительственные учреждения. План, по мнению его создателей, «позволит сохранить жизнеспособность и мировое лидерство химической индустрии США в мировом пространстве».

Сфера исследований в области катализа поделена на две рубрики — «важнейшие области применения» и «перспективные научные области». Помимо данных тем, важная роль отводится вопросам контроля над стабильностью и сроком службы катализаторов; однако

радикально новые идеи и подходы к решению этих вопросов связаны с другой научной областью.

Кроме того, важным моментом, связанным с определенными областями применения, должна стать реализация инновационных системных подходов к катализу (например, проектирование новых реакторов, минимизация отходов, сокращение энергопотребления, создание эффективных методов избирательной доставки реагента или выведения продуктов).

Области применения катализа

Самыми важными областями применения катализа, от успехов в которых зависит достижение поставленных целей, называются:

1. Избирательное окисление
2. Активация алканов
3. Минимизация побочных продуктов и отходов
4. Избирательный синтез, например, стерео- и региоселективный синтез
5. Алкилирование

6. Полимеризация олефинов
7. Альтернативные и восстанавливаемые сырьевые материалы

Общим направлением разработки новых технологий в данной сфере должно стать уменьшение энергетических затрат (за счет более высокой избирательности), снижение температуры или давления и сокращение производственного цикла.

Кроме базового списка разработчики предъявили жесткое методологическое требование. «Отсутствие непрерывности в технологическом развитии данных областей, — заявили они, — может нанести чрезвычайный экономический и даже экологический ущерб» — звучит несколько парадоксально и в некоторой степени может обескуражить лишь желанием ученых обеспечить непрерывную поддержку разработок со стороны государства, что, впрочем, может пойти только на пользу мировой науке.

Направления развития

Сфера катализа — широкое техническое поле, однако экономическое значение катализа не в стоимости катализаторов как продуктов, а в тех химических реакциях, которые они делают возможными.

Однако химическая индустрия настолько обширна, что, сделав ориентиром только один катализатор/технологический процесс, она не добьется значительных изменений в области сокращения энергопотребления или минимизации отходов. Тогда как более масштабные усовершенствования в области катализа могут принести индустрии значительные выгоды в сфере экономики, экологии и энергопотребления.

Двумя главными целями, поставленными учеными из команды химического синтеза, были ускорение процессов открытия катализаторов и разработка катализаторов с селективностью, приближающейся к 100 %.

Ниже перечислены перспективные научные области, успех в которых может придать импульс развитию важнейших областей применения. Чтобы удовлетворить эти потребности, необходимо вложение значительных средств в исследования.

- Создание новых катализаторов за счет объединения теоретических и экспериментальных исследований с усовершенствованным компьютерным моделированием каталитических процессов.
- Разработка методик высокопроизво-

Катализ

Химический синтез включает в себя неорганический и органический синтез (переработка сырьевых материалов в полезные химикаты и продукты) с катализом и без него.

На долю каталитического химического синтеза сегодня приходится около 60 % выпускаемых химических продуктов и 90 % химических технологий. Поэтому исследования и разработки в области катализа определяют подавляющую часть достижений в сфере химического синтеза.

дительного синтеза катализаторов и новых «умных» тестов для организации быстрой проверки небольшого количества катализаторов в различных процессах и сокращения времени анализа за счет параллельной работы и автоматизации.

- Улучшение методик характеристики катализаторов при нынешних производственных условиях, в частности, при высокой температуре и высоком давлении (>1 атм.).
- Новые методики синтеза стабильных, высокопродуктивных катализаторов с контролем над структурой активного центра.

Маршрутная карта исследований катализа — технические ориентиры

В каждой из важнейших областей применения катализа определены группы технических ориентиров, которые могут стать основой для общего маршрута к достижению поставленных целей.

Активация алканов

- Определение факторов, влияющих на контролируемую активацию C-H связей металлами, оксидами металлов и комплексами переходных металлов.
- Открытие новых способов селективной переработки метана в продукты с большей молекулярной массой.
- Открытие и разработка новых видов катализаторов для получения низкомолекулярных алканов заданного строения и их переработки в промышленно полезные продукты.

Избирательное окисление

- Характеристика различных типов присутствия кислорода на поверхностях оксидов, а также их роли в активации алканов и последующем окислении.
- Определение факторов, отвечающих за селективность в избирательном окислении и окислительной дегидрогенизации алканов, избирательном окислении олефинов и ароматических углеводородов.

- Определение новых методов активирования O₂.
- Разработка новых катализаторов для избирательного окисления алканов, олефинов и ароматических углеводородов.

Алкилирование

- Разработка твердокислотных катализаторов алкилирования с устойчивой активностью, действующих при низких температурах.
- Определение факторов, отвечающих за плотность и твердость кислотных центров в твердокислотных катализаторах.

Минимизация побочных продуктов, отходов и энергопотребления

- Определение реакций и катализаторов для синтеза наиболее значимых в промышленном отношении продуктов с выходом, превышающим 90 %, и без образования токсичных побочных продуктов.
- Разработка высокоактивных катализаторов для разложения NO непосредственно в N₂ и O₂ в присутствии O₂, H₂O и сырьевых компонент, действующих как яды катализаторов или ингибиторы.
- Разработка активных, низкотемпературных катализаторов для контроля над содержанием летучих веществ и горением метана.
- Разработка катализаторов для эффективного гидрогенолиза хлоруглеводородов в RH и HCl.
- Разработка катализаторов для селективного удаления серы из сырьевых материалов и превращения SO_x в ценные продукты.
- Открытие и разработка катализаторов для производства промышленно значимых продуктов при более низких показателях температуры и давления, чем те, что характерны для современных технологических процессов.

Альтернативные и восстанавливаемые сырьевые материалы

- Разработка катализаторов для деполимеризации смешанных полимеров.
- Разработка катализаторов для ►

- ◀ избирательного синтеза химикатов из CO и CO₂.
- Разработка катализаторов для превращения целлюлозы и углеводов в химикаты.
- Улучшение существующих технологических процессов за счет сокращения уровня CO₂, произведенного как побочный продукт.

Полимеризация

- Определение методов достижения контроля над структурой и составом полимеров
- Разработка гетерогенных одноцентровых катализаторов.
- Разработка катализаторов для включения многообразных функциональных групп в процессе полимеризации олефинов.
- Разработка гетерогенных катализаторов для синтеза хиральных полимеров.

Высокопроизводительный синтез и тестирование катализаторов

- Определение высокопроизводительных методов синтеза катализаторов.
- Разработка высокопроизводительных аналитических методик для оценки качества катализаторов.
- Разработка протоколов реакций для быстрого отбора (скрининга) большого количества катализаторов при повышенном давлении.

Методики in situ

- Разработка in situ методик химического анализа поверхностей катали-

заторов с атомным разрешением, которые применимы в нынешних производственных условиях.

- Разработка методик быстрой оценки структуры катализатора и абсорбата в условиях реакции.
- Разработка методик прогнозирования, направляющих и ускоряющих создание катализаторов для специфических областей применения.

Теоретические методы

- Разработать эффективное количество химических методов, позволяющих оперировать группами из 100–1 000 атомов.
- Разработать точные методы прогнозирования показателей коэффициентов для элементарных процессов на поверхности катализатора.
- Разработать эффективные методики прогнозирования и алгоритмы для описания протекающих одновременно реакции и диффузии в пористых катализаторах.
- Подтвердить результаты теоретических вычислений посредством сравнения с экспериментальными данными, полученными в производственных условиях.
- Показать, что теоретические методы могут быть с успехом использованы для прогнозирования качеств новых материалов или реакций.

Этапы

Вот как будет развиваться катали-

тическая химия до 2020 года — в случае, если будет обеспечено безостановочное финансирование разработанной программы.

- I. Твердые кислоты заменяют во множестве промышленных технологий жидкие кислоты, такие как HF, H₂SO₄ и другие.
- II. В научной/патентной литературе описывается успешное компьютеризированное наноструктурное изготовление активных центров, производящих экономически жизнеспособные катализаторные структуры.
- III. Катализаторные системы широко используются в производстве продуктов тонкой химии.
- IV. Достаточное количество удобных в обращении программ молекулярного проектирования и новых in situ методов характеристики катализаторов используется в повседневной работе тех, кто занимается открытием новых катализаторов.
- V. На рынке появляются новые полиолефиновые материалы, произведенные при катализе из ионизирующих олефиновых мономеров.
- VI. Практически завершена разработка промышленных технологий превращения алкенов в алкановое сырье для нефтехимической продукции.
- VII. Комбинаторные методы получили признание у бизнеса и научного сообщества как еще один успешный путь к открытию новых свинцовых катализаторов.
- VIII. Переработка этана в жидкости (такие как чистое дизельное топливо) становится экономически выгодным.
- IX. CO₂/CO становятся ценными сырьевыми материалами в производстве молекул, важных для химической индустрии.
- X. Инфраструктура и технологии катализа позволяют производить некоторые из числа 50 основных химикатов из биомассы и/или восстанавливаемых органических материалов (рост производства химикатов из ископаемого топлива неуклонно замедляется).
- XI. Каталитическое горение происходит в условиях стационарных центров для сокращения выбросов в производстве энергии.

Колебания экономики или другие объективные факторы в силах повлиять на сроки воплощения этой программы, которая сейчас выглядит поистине фантастично, но не изменят результата — уже наше поколение будет наблюдать принципиально иные способы производства окружающих нас предметов... ■



Исследования и разработки в области катализа определяют подавляющую часть достижений в сфере химического синтеза