

ЕНЕРГЕТИКА ТА ЕНЕРГОЗБЕРЕЖЕННЯ

УДК 504.536.7

Техніко-економічний аналіз уловлювання вуглекислого газу з повітря в кліматичних умовах України**П. В. Скрипник^{1✉}, В. В. Серета²**¹⁻²Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського», вул. Політехнічна, 6, Київ, 03056, Україна✉ e-mail: ¹polinaskrypnyk2@gmail.comORCID: ¹<https://orcid.org/0009-0009-3588-759X>; ²<https://orcid.org/0000-0002-4645-3123>

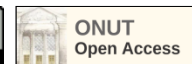
У роботі презентовано результати досліджень, проведених для визначення оптимальних умов роботи системи вловлювання вуглекислого газу з повітря для кліматичних умов України. Уловлювання діоксиду вуглецю є критично важливим для збереження стійкості клімату, враховуючи загрозу глобальних змін, спричинених усе більшою концентрацією парникових газів у атмосфері. Вуглецево-негативна технологія вловлювання вуглекислого газу з повітря за допомогою твердих сорбентів є можливим і перспективним варіантом пом'якшення наслідків зміни клімату в Україні. У роботі описано етапи роботи повітряного контактора з «перемиканням» між фазами адсорбції та десорбції за допомогою нагрівання-охолодження сорбенту. Подано хімічні та фізичні властивості перспективних сорбентів Zeolite13X та MOF-177. Розроблено принципову схему та математичну модель уловлювання діоксиду вуглецю з використанням твердих сорбентів. Модель ураховує термодинамічні аспекти адсорбції та десорбції в повітряному контакторі. Показано, що адсорбційна ємність сорбентів, витрата повітря і температура десорбції є ключовими чинниками, які впливають на продуктивність і експлуатаційні витрати системи. Визначені інтегральні річні середні значення адсорбційної ємності сорбентів для температурної зони м. Києва. Установлено, що найбільш енергозатратним етапом роботи системи є нагрівання сорбенту до температури десорбції. Підібрано оптимальні значення температури десорбції (100 °C), витрати повітря, яке надходить до контактора (від 1 до 2 м³/с) і тривалості адсорбції (3,1 год для Zeolite13X та 0,12 год для MOF-177). За таких умов 1 повітряний контактор із MOF-177 може вловлювати 6,67 т діоксиду вуглецю за рік, а Zeolite13X – 30,15 т за рік. Водночас собівартість уловлювання 1 т діоксиду вуглецю становить 919\$ для MOF-177 та 113\$ для Zeolite13X.

Ключові слова: Декарбонізація, Ключові показники ефективності; Тверді сорбенти; Техніко-економічний аналіз; Уловлювання вуглекислого газу з повітря.

doi: <https://doi.org/10.15673/ret.v59i4.2808>

© The Author(s) 2023. This article is an open access publication

This work is licensed under the Creative Commons Attribution 4.0 International License (CC BY)

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>**1. Вступ**

У сучасному світі надмірна концентрація вуглекислого газу (CO₂) в атмосфері відіграє критичну роль у глобальних змінах клімату. Через постійне збільшення викидів CO₂ унаслідок промислової діяльності, використання паливних ресурсів та інших антропогенних джерел стрімко підвищуються тем-

ператури на Землі. Згідно з останнім звітом Міжурядової групи експертів зі зміни клімату, мета Паризької угоди 2015 року все ще досяжна [1]. Водночас через тривалу війну в Україні надзвичайно погіршилася екологічна ситуація через величезні викиди CO₂ у повітря. За офіційними даними Міністерства захисту довкілля та природних ресурсів України [2] через напад Росії на Україну сталося вики-

дів щонайменше 33 млн т CO_2 , що поглиблює вже наявний негативний вплив на клімат планети.

Нині наявні три ключові вуглецево-нейтральні технології, спрямовані на зменшення викидів CO_2 з антропогенних джерел: 1) уловлювання CO_2 після спалювання викопного палива; 2) уловлювання CO_2 перед спалюванням викопного палива; 3) спалювання палива і чистого кисню [3]. Технології вловлювання CO_2 перед спалюванням викопного палива та спалювання палива і чистого кисню перебувають на етапі активного наукового й технічного розвитку, мають високий потенціал у зниженні викидів парникових газів. Натомість технологія вловлювання CO_2 після спалювання викопного палива є комерційно доступною, тому її вже успішно використовують на вугільних електростанціях потужністю від 500 МВт.

Застосування вуглецево-нейтральних технологій уловлювання CO_2 в Україні може бути проблематичним. Причинами є застарілість наявних енергетичних станцій та високі фінансові витрати на заміну їх сучасним обладнанням. Окрім того, в Україні функціонує децентралізована система теплопостачання, що складається із численних групових, районних, модульних котельень. Водночас багато будівель обладнано індивідуальними системами опалення. Це зумовлює пошук альтернативних рішень для декарбонізації теплопостачання в Україні.

Варто зауважити, що вуглецево-нейтральні технології вловлювання CO_2 остаточно не вирішують проблеми зміни клімату. Це зумовлено тим, що після досягнення вуглецевої нейтральності надлишок CO_2 усе одно залишається в атмосфері та вимагатиме подальшого вилучення. З огляду на це великого значення набуває розвиток саме вуглецево-негативних технологій, спрямованих на активне вилучення CO_2 безпосередньо з атмосфери. Однією з таких технологій є вловлювання вуглекислого газу з повітря (direct air capture, DAC).

2. Аналіз літературних джерел

На сьогодні для DAC використовують рідкі (солвенти) або тверді (сорбенти) речовини [4]. Особливістю застосування солвентів є високі капіталовкладення, великі розміри та значна потужність обладнання. Для розміщення таких установок потрібна територія еквівалентна 200 футбольним полям [4]. DAC, що використовує солвенти, може бути вигідним для розвинутих країн, але не для країн з економікою, яка розвивається. Використання твердих

сорбентів потребує значно менших розмірів обладнання, що робить установки такого типу більш компактними і дешевшими, порівняно з DAC на основі рідких речовин. Технологія DAC, яка експлуатує тверді речовини, має потенціал для встановлення у різних місцях, разом з населеними пунктами та промисловими зонами.

Основним компонентом DAC-системи з твердими сорбентами є повітряний контактор (рис. 1). Система працює періодично в три етапи [5]. Перший етап – адсорбція. Повітря потрапляє в контактор та проходить крізь пори сорбенту. Молекули CO_2 дифузують на поверхні адсорбційного матеріалу, а чисте (без CO_2) повітря виходить у навколишнє середовище.

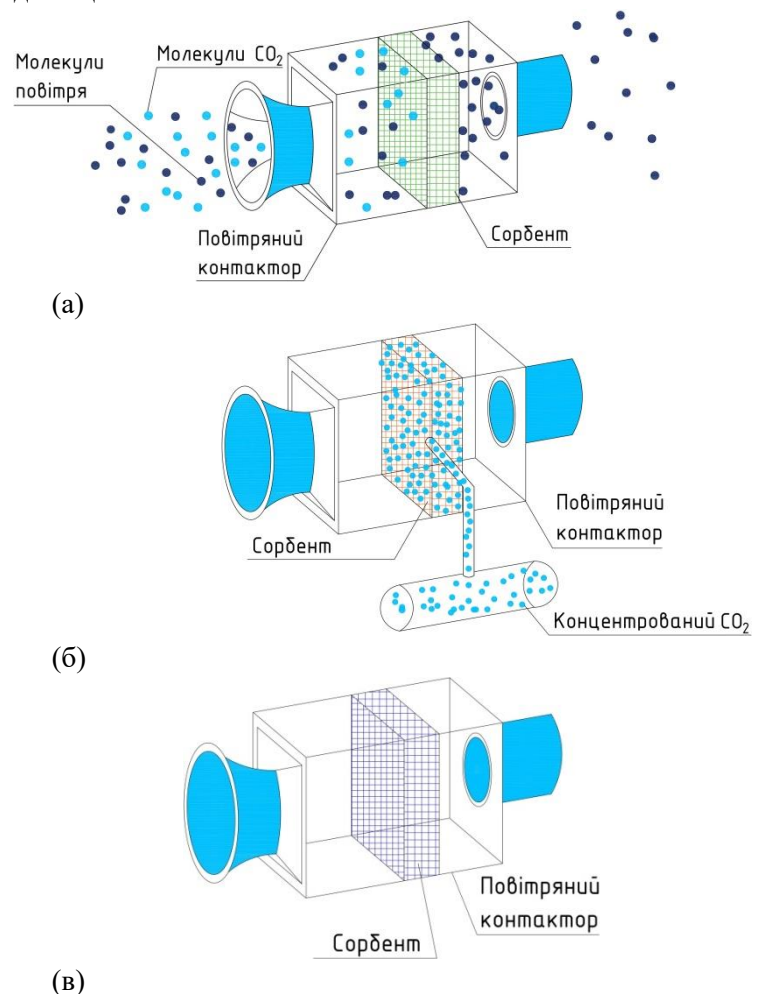


Рисунок 1 – Фази роботи системи DAC: а – адсорбція; б – десорбція; в – охолодження [5]

Другий етап – десорбція. Під час цього етапу сорбент нагрівають. Завдяки підвищенню температури молекули CO_2 від'єднуються від сорбенту і потрапляють у резервуар для подальшого стиснення. Третій етап – охолодження повітряного контактора до температури зовнішнього повітря для повторення етапу адсорбції. «Перемикання» між етапами ад-

сорбції та десорбції за допомогою нагрівання-охолодження сорбенту називають адсорбцією за коливання температури (temperature swing adsorption, TSA).

Сорбенти, які використовують для захоплення молекул CO_2 , класифікують за їх фізичною або хімічною сорбцією. До найбільш поширених сорбентів для DAC належать цеоліти й метало-органічні каркаси (MOFs).

Наприклад, Zeolite13x [6] є фізичним сорбентом групи цеолітів, оскільки він не взаємодіє з CO_2 на молекулярному рівні, а просто вловлює молекули газу своєю мікропористою структурою, показаною на рис. 3.

MOFs уважають хімічними сорбентами, оскільки це метало-органічні каркаси, які у своєму складі мають різні метали та органічні ліганди [7], що створюють ідеальні умови для зберігання і поглинання різних речовин. Наприклад, основним(и) матеріалом(ами) MOF-177 є тетраедричний кластер оксиду цинку (Zn_4O) та ліганди бензолтрибензоату, які добре взаємодіють, унаслідок чого формуються великі пори і поверхня [8]. Пориста структура MOF-177, яка зображена на рис. 2, дає змогу ефективно захоплювати й розміщувати молекули в внутрішній порожнині, що забезпечує високу ефективність адсорбції.

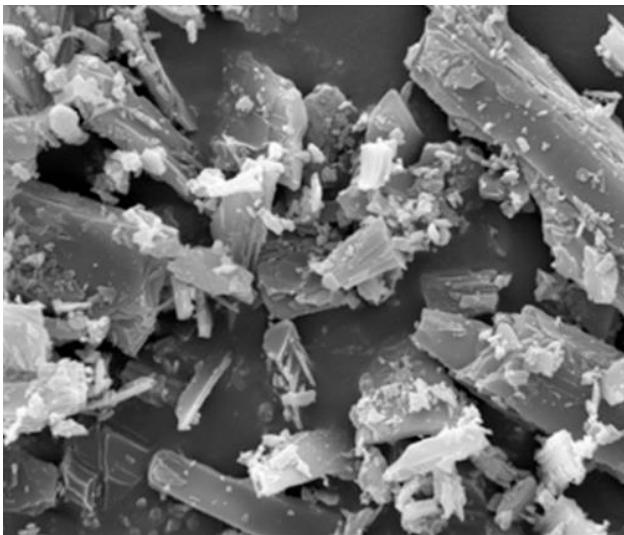


Рисунок 2 – Структура сорбенту MOF-177 [9]

Zeolite13X та MOF-177 є перспективними для системи вловлювання вуглекислого газу з повітря, оскільки вони мають високу селективність, потужність і стійкість у поглинанні CO_2 з атмосфери. Їх різноманітні механізми сорбції, що залежать від фізичних та хімічних властивостей, дають змогу оптимізувати регенерацію сорбенту і знизити енерговитрати на цей процес. Вони мають велику поверх-

ню, пористу структуру та регульовану хімію поверхні, що підвищує їх продуктивність і дає змогу адаптуватися до різних умов DAC.

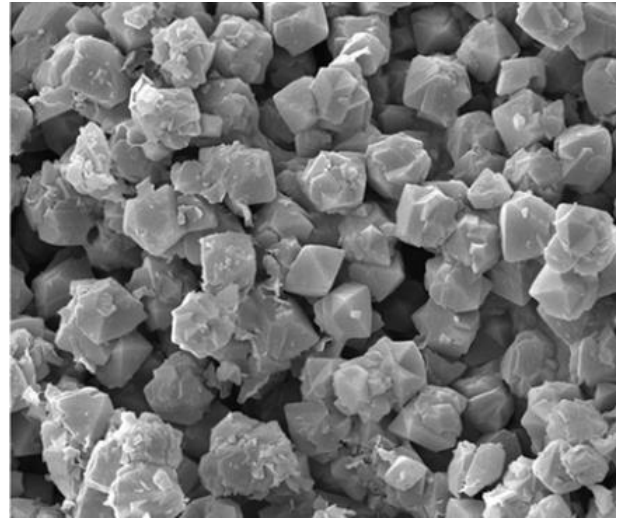


Рисунок 3 – Структура сорбенту Zeolite13X [10]

Використання цих сорбентів забезпечує ефективне та економічне захоплення CO_2 з повітря, сприяючи зменшенню вуглецевого сліду в кліматі.

На сьогодні у світі функціонує 19 установок DAC, які разом уловлюють 0,01 Мт CO_2 /рік [4]. Аналіз останніх досліджень показав, що більшість наукових праць зосереджено на експериментальних дослідженнях фізичних та хімічних властивостей сорбентів [11; 12] та визначенні ключових показників ефективності [13]. Однак мало уваги приділено аналізу енергоспоживання системи DAC залежно від зміни її термодинамічних параметрів. Окрім того, бракує належного обґрунтування вибору робочих параметрів та дослідження установок DAC у кліматичних умовах України.

Мета дослідження – розробити математичну модель твердого DAC, що дасть змогу виконати техніко-економічний аналіз та встановити оптимальні умови роботи DAC для кліматичних умов України.

3. Об'єкт, предмет і методи дослідження

Об'єкт дослідження: технологія вловлювання вуглекислого газу з повітря твердими сорбентами.

Предмет дослідження: техніко-економічні показники системи DAC.

Методи дослідження: Науково-методичну основу досліджень становили методи математичного і термодинамічного моделювання. Результати теоретичних досліджень обробляли з використанням пакетів прикладних програм Mathcad, AutoCAD та Microsoft Excel.

3.1. Конструктивні особливості DAC-систем

Схему установки DAC, яка працює за принципом TSA, показано на рис. 4. Установка складається з

3 контакторів, вентиляторів, повітроводів для повітря та CO₂, контурів підігрівання та охолодження контакторів.

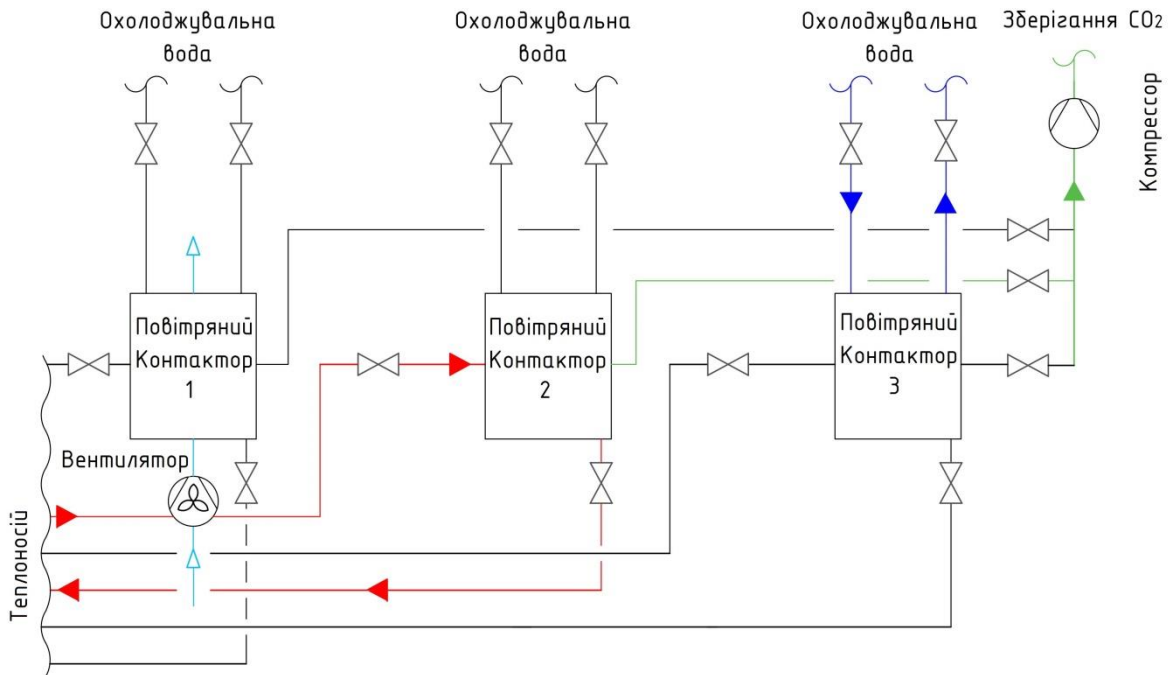


Рисунок 4 – Принципова схема DAC із циклом TSA

Під час адсорбції вентилятор затягує повітря з навколишнього середовища в контактор і проганяє його через сорбент. Молекули CO₂ зв'язуються із сорбентом, а повітря потрапляє назад до навколишнього середовища. Після завершення адсорбції починається десорбція. Повітряний контактор закритий для зовнішнього повітря. Для початку десорбції потрібно підвести теплоту в повітряний контактор та нагріти сорбент. Під час нагрівання сорбенту молекули CO₂ відділяються та потрапляють у повітровід для подальшого стиснення та зберігання. Після того як весь CO₂ відділився від сорбенту, починається охолодження. Температуру сорбенту знижують до температури навколишнього середовища. Як холодоносії через повітряний контактор може циркулювати колодязна або поверхнева вода. Після циркуляції вода повертається в землю через свердловину, колодязь для підживлення або поверхневий скид. Унаслідок

цього охолоджений сорбент знову адсорбується та цикл повторюється.

3.2. Розроблення математичної моделі

Для моделювання циклу, показаного на рис. 1, зроблено такі припущення:

- цикл TSA працює за стаціонарних умов;
- атмосферний тиск зовнішнього повітря і кон-

центрацію CO₂ у повітрі беремо постійними і рівними 101,3 кПа і 400 ppm відповідно;

- втрат теплоти від будь-якого обладнання установки не враховуємо;
- витратами на електричну енергію для насосів нехтуємо;
- повітря вважаємо ідеальним газом;
- екологічний аспект системи DAC має більше значення, ніж економічний аспект.

Геометричні розміри повітряного контактора компанії Climeworks [15] подано на рис. 5.

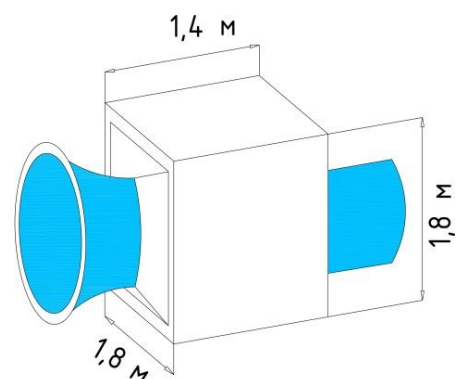


Рисунок 5 – Повітряний контактор компанії Climeworks [14]

Ключові рівняння термодинамічної моделі DAC за принципом циклу TSA мають такий вигляд.

Поглиняльну здатність для MOF-177 визначено за моделлю Дубініна–Астахова [15]:

$$q = q_m \cdot e^{-\left[\frac{RT}{\alpha + \beta T} \ln\left(\frac{P_0}{P}\right)\right]^n}, \quad (1)$$

де q_m (ммоль \cdot г $^{-1}$) – гранична адсорбована кількість газу; R (Дж \cdot моль $^{-1}$ \cdot К $^{-1}$) – універсальна газова стала; α (Дж \cdot моль $^{-1}$) і β (Дж \cdot моль $^{-1}$ \cdot К $^{-1}$) – ентальпійний та ентропійний коефіцієнти; P_0 (Па) – тиск газу за температури навколишнього середовища; n – константа. Теплові та адсорбційні властивості MOF-177/CO $_2$ подано в табл. 1 [15].

Таблиця 1 – Теплові та адсорбційні властивості MOF-177/CO $_2$ [15]

Властивості	Значення	Одиниці вимірювання
q_m	37,4	ммоль \cdot г $^{-1}$
α	100	Дж \cdot моль $^{-1}$
β	34,8	Дж \cdot моль $^{-1}$ \cdot К $^{-1}$
P_0	72,14	МПа
n	2	–

Поглиняльну здатність для Zeolite13x визначено за моделлю Тота [16]:

$$q = \frac{a \cdot P}{[1 + (b \cdot P)^t]^{1/t}}, \quad (2)$$

де q (моль \cdot г $^{-1}$) – поглиняльна здатність Zeolite13; P (кПа) – парціальний тиск CO $_2$; E (К) – ступінь теплоты адсорбції; b – константа рівноваги; a – параметр, пов'язаний з b та ємністю насичення; t – показник ізотерми Тота. Параметри a , b , t визначають за рівняннями (3)-(5):

$$b = b_0 e^{(E/T)}; \quad (3)$$

$$a = a_0 e^{(E/T)}; \quad (4)$$

$$t = t_0 + c/T. \quad (5)$$

Дані, за допомогою яких визначають поглиняльну здатність сорбенту Zeolite13x, подано в табл. 2.

Таблиця 2 – Параметри сорбенту Zeolite13x [16]

Параметри	Значення	Одиниці вимірювання
a_0	$6,509 \cdot 10^{-3}$	моль \cdot кГ $^{-1}$ \cdot кПа $^{-1}$
b_0	$4,884 \cdot 10^{-4}$	кПа $^{-1}$
E	2991	К
t_0	$7,487 \cdot 10^{-2}$	–
c	38,05	К

Тривалість адсорбції / десорбції визначають за рівнянням [17]:

$$\frac{\partial q_i}{\partial t} = k_i (q_i^{eq} - q_i), \quad (6)$$

де k_i (с $^{-1}$) коефіцієнт масопередавання; q_i^{eq} (моль \cdot кГ $^{-1}$) – концентрація CO $_2$ за адсорбції; q_i (моль \cdot кГ $^{-1}$) – концентрація CO $_2$ за десорбції; t (К) – середня температура навколишнього повітря.

Робочу потужність сорбентів розраховують за рівнянням (7) [16]:

$$WC = q_c - q, \quad (7)$$

де q_c , q – поглиняльні здатності сорбенту під час адсорбції та десорбції відповідно.

Кількості вловленого CO $_2$ за рік обчислюють за рівнянням (8):

$$M = C \cdot N \cdot M_{CO_2}, \quad (8)$$

де M (тонни) – маса вловленого CO $_2$ за рік; N (моль) – кількість CO $_2$; M_{CO_2} (кГ \cdot моль $^{-1}$) – молярна маса CO $_2$; C – кількість циклів за рік, яку знаходять за рівнянням (9):

$$C = \frac{365 \cdot 24 \cdot 3600}{\tau}, \quad (9)$$

де τ (год) – час одного циклу, який розраховують за рівнянням (10):

$$\tau = \tau_{de} + \tau_{ad} + \tau_c, \quad (10)$$

де τ_{de} – час десорбції; τ_{ad} – час адсорбції; τ_c – час охолодження.

Кількість електричної енергії за рік роботи контактора обчислюють за рівнянням (11):

$$N = N_z \cdot \tau_{ad} \cdot C, \quad (11)$$

де N_z (кВт) – потужність вентилятора, яку знаходять за рівнянням (12):

$$N_z = \frac{m \cdot \Delta P \cdot l}{10 \eta}, \quad (12)$$

де m (м 3 /с) – витрата повітря; η – ККД вентилятора; l (м) – глибина повітряного контактора; ΔP – перепад тиску, який визначають за рівнянням (13) [17]:

$$\Delta P = \frac{150 \cdot \mu \cdot v \cdot (1 - \varepsilon)^2}{d_p^2 \varepsilon^3} + 1,75 \frac{\rho \cdot v^2 (1 - \varepsilon)}{d_p \varepsilon^3}, \quad (13)$$

де μ (Па \cdot с) – в'язкість газу; v (м/с) – швидкість газу; ε – пористість сорбенту; ρ (кГ/м 3) – густина газу; d_p (м) – діаметр сорбенту.

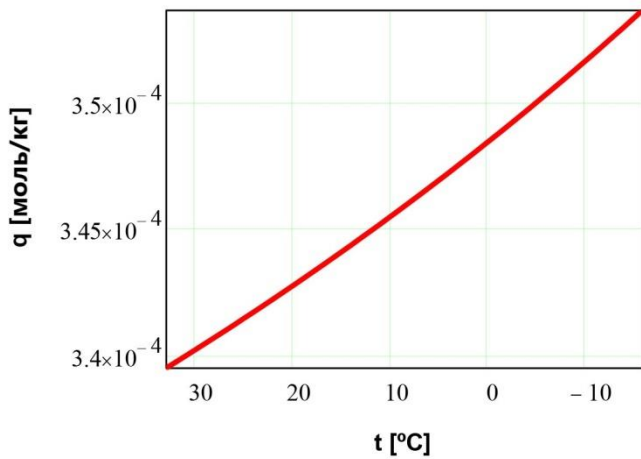
Кількість затраченої теплової енергії за рік розраховують за рівнянням (14):

$$Q = Q_r \cdot C, \quad (14)$$

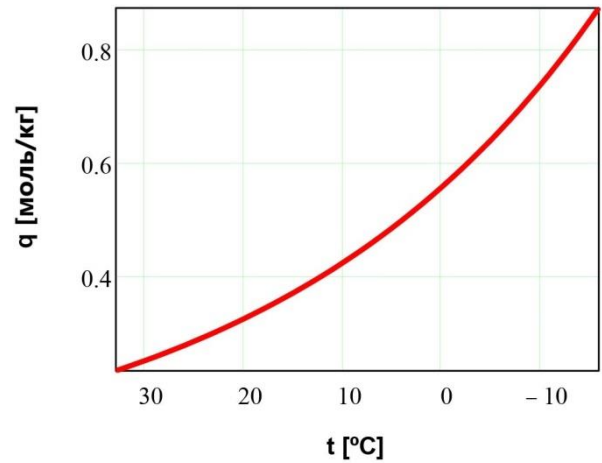
де Q_r (Дж) – кількість теплоти, яка потрібна для нагрівання сорбенту, знаходять за рівнянням (15):

$$Q_r = \frac{1}{WC} \cdot c_p(t_{de} - t_{ad}) \cdot N_{CO_2}, \quad (15)$$

де c_p (Дж · кг/К) – питома теплоємність сорбенту; N_{CO_2} (моль) – кількість уловленого CO_2 сорбентом.



(а)



(б)

Рисунок 6 – Графік залежності поглинальної здатності сорбентів від зміни температури протягом року: а – MOF-177; б – Zeolite13X

4. Результати

Щоб визначити залежність поглинальної здатності сорбентів від температури зовнішнього повітря, скористаємося кліматичними даними IWEC для міста Києва (I кліматична зона) [18]. Варто зауважити, що основна частина України належить до першої температурної зони. Міжнародні кліматичні файли погоди для міста Києва майже не відрізняються за середньомісячними значеннями зовнішньої температури від нормативної кліматології України.

Як бачимо на рис. 3, поглинальна здатність MOF-177 у 1000 разів менша, ніж Zeolite13X. Таким чином, за однакового об'єму цих сорбентів у контакторі, MOF-177 уловить набагато менше CO_2 з повітря, ніж Zeolite13X.

Поглиноальна здатність суттєво залежить від t . Протягом року поглинальна здатність Zeolite13X змінюється від 0,25 до 0,85 моль/кг (на 70,6 %), а MOF-177 від $3,3 \cdot 10^{-4}$ до $3,5 \cdot 10^{-4}$ моль/кг (на 5,7 %). На рис. 6 показано, що в разі збільшення t поглинальна здатність сорбентів знижується. З огляду на це для холодного періоду року потрібна менша кількість сорбентів, щоб уловити однакову кількість CO_2 , порівняно з теплим періодом.

Як бачимо на рис. 7, найбільшу кількість днів у році вловлювальна здатність становить близько 0,5–0,6 моль/кг. Інтегральне річне середнє значення q

(показано штриховою лінією) для Zeolite13X становить 0,45 моль/кг. Для MOF-177 характер змінювання q повністю аналогічний показаному на рис. 7. Інтегральне річне середнє значення MOF-177 становить $3,46 \cdot 10^{-4}$ моль/кг.

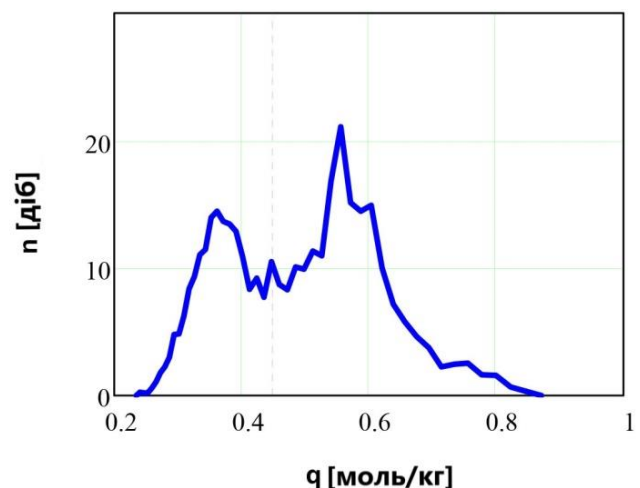


Рисунок 7 – Змінювання поглинальної здатності Zeolite13X протягом року

Як бачимо на рис. 8, характер зміни кривих однаковий для MOF-177 та Zeolite13X. Зменшення витрати повітря, яке надходить до контактора, приводить до збільшення тривалості наповнення сорбенту вуглекислим газом. За витрати повітря від 1 до 2

$\text{м}^3/\text{с}$, час адсорбції та потужність вентилятора мають найнижчі значення. За подальшого підвищення потужності та витрати повітря час адсорбції майже не змінюється. Таким чином, оптимальні значення ви-

трати повітря для цього процесу перебувають у межах від 1 до 2 $\text{м}^3/\text{с}$. Адже потужність вентилятора істотно не підвищується, водночас час уловлювання CO_2 є мінімальним.

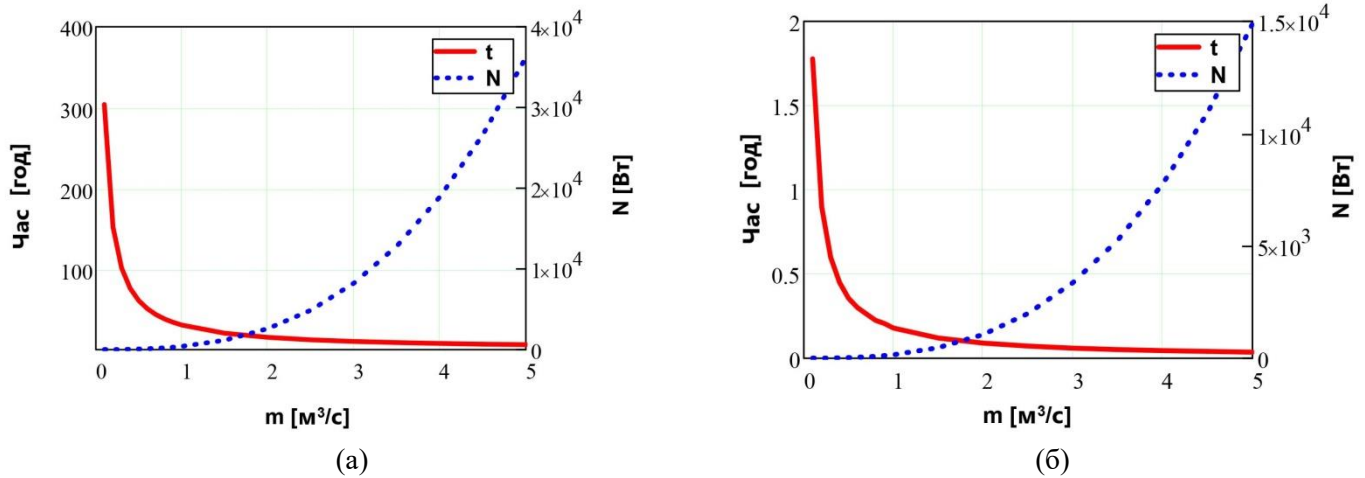


Рисунок 8 – Залежність потужності вентилятора і тривалості процесу адсорбції від витрати повітря: а – MOF-177; б – Zeolite13X

Це свідчить про економічність системи. Слід зауважити, що абсорбція CO_2 у MOF-177 відбувається значно швидше, ніж у Zeolite13X. Це зумовлено тим, що поглинальна здатність MOF-177 набагато

нижча, ніж у Zeolite13X (див. рис. 6). Для подальших розрахунків беремо $m = 1,5 \text{ м}^3/\text{с}$. Тоді час адсорбції для Zeolite13X та MOF-177 становить 3,1 та 0,12 год відповідно (див. рис. 8).

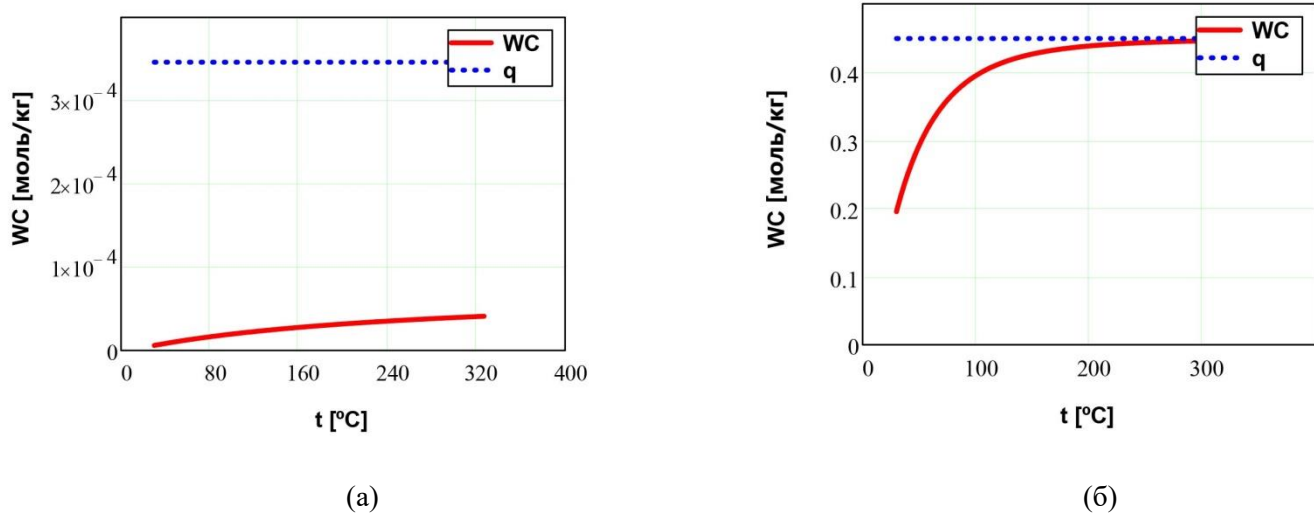


Рисунок 9 – Вплив температури нагрівання сорбентів на їх адсорбційну здатність під час десорбції: а – MOF-177; б – Zeolite13X

Вплив температури нагрівання сорбентів на їх адсорбційну здатність під час десорбції проілюстровано на рис. 9. Характер змінювання WC для сорбентів різний. Для Zeolite13X WC досягає максимального значення 0,45 моль/кг за $t = 200 \text{ °C}$ і майже не змінюється з подальшим підвищенням t . Для MOF-177 WC постійно зростає, досягаючи макси-

мальних значень за високих температур (вище ніж 200 °C).

Як бачимо на рис. 10, час десорбції обох сорбентів зменшується зі збільшенням температури нагрівання. Чим вища температура сорбентів, тим швидше відокремлюються молекули CO_2 . За цих умов збільшується кількість тепла, яку потрібно підвести

до повітряного контактора для нагрівання сорбентів. Найвне оптимальне значення температури десорбції, після якого подальше подавання тепла втрачає сенс, оскільки час десорбції не зменшується. Слід зауважити, що для вивільнення CO₂ з MOF-177 потрібно на 17,4 % менше теплової енергії порівня-

но з Zeolite13X. Як бачимо на рис. 10, що за температури 100 °C час десорбції становить 2 год для Zeolite13X і 110 с (0,03 год) для MOF-177. Це зумовлено тим, що за один цикл роботи з MOF-177 потрібно видалити набагато менше CO₂, ніж із Zeolite13X.

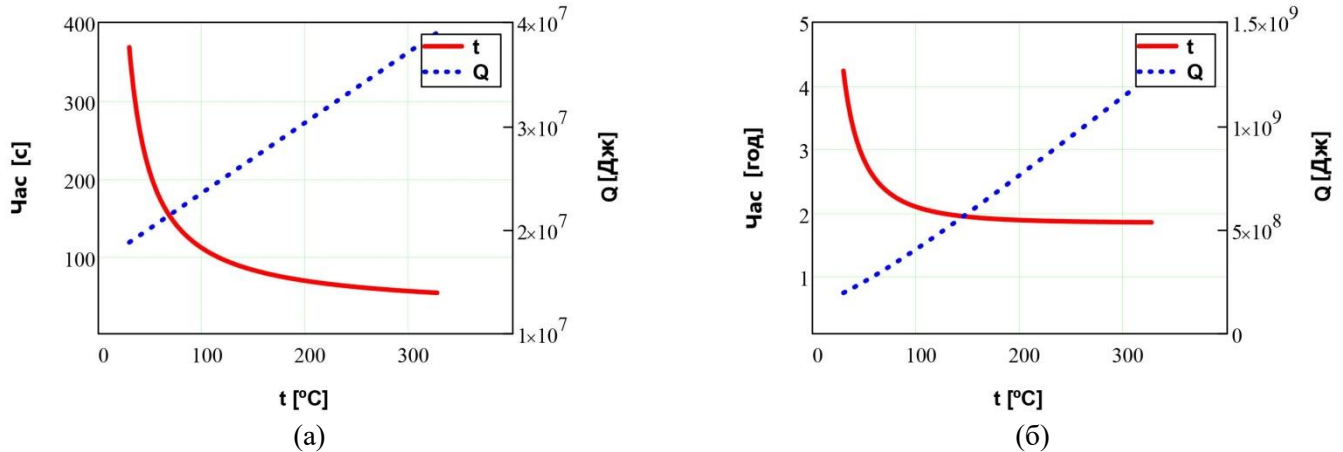


Рисунок 10 – Залежність часу десорбції сорбентів від температури: а – MOF-177; б – Zeolite13X

Кількість CO₂, що вловлює за рік один повітряний контактор, та енергоспоживання було визначено для оптимальних параметрів: $m = 1,5 \text{ м}^3/\text{с}$; $\tau_{\text{ад}} = 0,12 \text{ год}$; $\tau_{\text{де}} = 0,03 \text{ год}$ – для MOF-177, $\tau_{\text{ад}} = 20,235 \text{ год}$; $\tau_{\text{де}} = 2 \text{ год}$ – для Zeolite13X. Як бачимо на рис. 11, MOF-177 уловлює 6,67 т CO₂/рік, тоді як Zeolite13X – 30,15 т CO₂/рік. Це зумовлено тим, що адсорбційна здатність MOF-177 нижча, ніж у Zeolite13X (рис. 6). Таким чином, MOF-177 захоплює менше CO₂ за цикл і потребує менших витрат енергії для видалення CO₂ під час десорбції.

та 86109 кВт-год/рік теплової енергії для регенерації. Водночас Zeolite13X потребує 8433 та 40 116 кВт-год/рік відповідно.

У системах DAC зазвичай використовують безвуглецеву електроенергію [5], річну вартість якої показано на рис. 12. Співвідношення між енергією десорбції та енергією вентилятора для MOF-177 становить 99/1 %, а для Zeolite13X – 83/17 %.

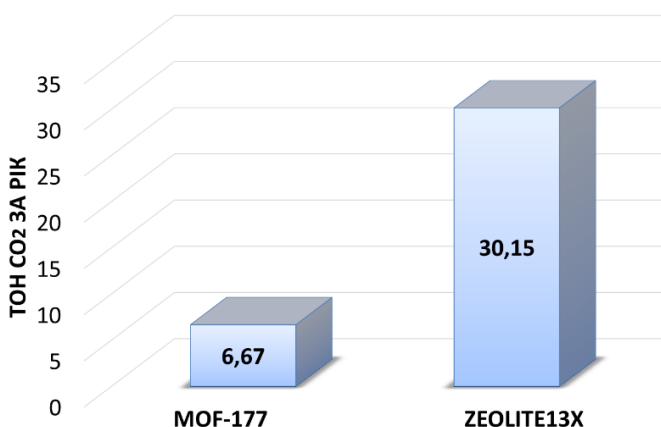


Рисунок 11 – Кількість уловленого CO₂ за рік

Як бачимо на рис. 8-10, MOF-177 потребує 756 кВт-год/рік електричної енергії для вентилятора

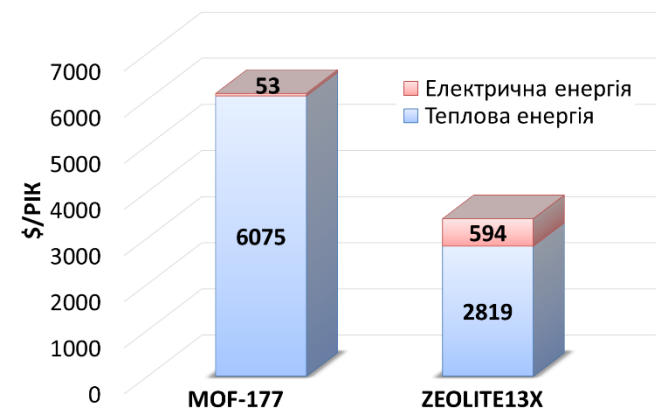


Рисунок 12 – Вартість затраченої енергії за рік

Установивши кількість уловленого CO₂ та вартість спожитої енергії за рік, визначили економічну ефективність уловлювання 1 т CO₂. Як бачимо на рис. 13, вартість 1 т CO₂ для MOF-177 становить 919 \$, а для Zeolite13X – 113 \$. Таким чином, уловлювання CO₂ за допомогою Zeolite13X у 8 разів дешевше.

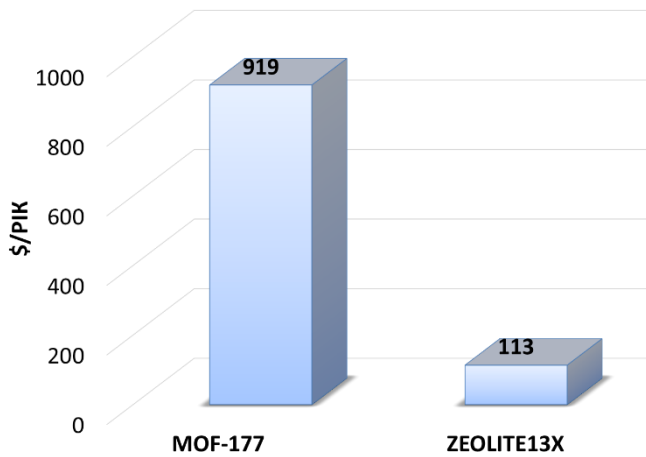


Рисунок 13. Собівартість уловлювання CO₂

5. Висновки

Системи вловлювання CO₂ з повітря з використанням твердих сорбентів є перспективними для країн з різним рівнем економічного розвитку, зокрема для України.

Установлено, що температура навколишнього повітря суттєво впливає на адсорбційну здатність твердих сорбентів. За низьких температур адсорбційна здатність зростає. Це сприяє оптимальному функціонуванню системи DAC у кліматичних умовах України та більшості країн Центральної Європи.

На оптимальну продуктивність системи DAC найбільше впливають адсорбційна здатність сорбенту, масова витрата повітря і температура десорбції. Масова витрата повітря 1,5 м³/с і температура десорбції 100 °C забезпечують ефективне видалення CO₂ з повітря.

З погляду експлуатації Zeolite13X є більш економічним та ефективним, ніж MOF-177. Вартість уловлювання однієї тонни CO₂ за допомогою Zeolite13X становить 113 \$, тоді як за допомогою MOF-177 – 919 \$. Окрім того, Zeolite13X може вловлювати в 4,5 разу більше CO₂, ніж MOF-177.

Найбільшими експлуатаційними витратами системи DAC є витрати енергії на нагрівання сорбенту для десорбції. Для цих цілей доцільно використовувати відпрацьоване промислове тепло. Це дасть змогу суттєво (до 5 разів) знизити собівартість уловлювання CO₂.

Подальші дослідження будуть спрямовані на утилізацію скидного тепла промислових підприємств у системах DAC із твердими сорбентами для підвищення енергоефективності; зниження собівар-

тості вловлювання CO₂; пошук оптимальних режимів роботи DAC за різних кліматичних умов.

Література

1. IPCC. AR6 Synthesis Report: Climate Change 2023.
2. Environmental of Ukraine // Facebook. – 2023.
3. National Energy Technology Laboratory. Carbon dioxide capture approaches // Gasifipedia. – 2023. – № 9.2.
4. Ozkan M., Nayak S. P., Ruiz A. D., Jiang W. Current status and pillars of direct air capture technologies // iScience. – 2022. – №25 (4). – P.103990.
5. Beuttler C., Charles L., & Wurzbacher J. The Role of Direct Air Capture in Mitigation of Anthropogenic Greenhouse Gas Emissions // Frontiers in Climate. – 2019. – № 1.
6. BASF. 13X Molecular Sieve: Technical Data Sheet. – 2020. – Rev.08.
7. Aljamali N. M., Abadi A., Alfatlawi I. O., Ma N. Review on Organic Ligands with Their Various Applications // International Journal of Chem-informatics Research. – 2019. – Vol. 5: Issue 1. – P. 41-54.
8. Müller M., Lebedev O. I., Fischer R. A. Gas-phase loading of [Zn₄O(bt₂)₂] (MOF-177) with organometallic CVD-precursors: inclusion compounds of the type [LnM]a@MOF-177 and the formation of Cu and Pd nanoparticles inside MOF-177 // Journal of Materials Chemistry. – 2008. – №18 (43). – P. 5274.
9. Santos K. M. C., Santos R. J. O., De Araújo Alves M. M., De Conto J. F., Borges G. R., Dariva C., Egues S. M., Santana C. C., Franceschi E. Effect of high pressure CO₂ sorption on the stability of metal-organic framework MOF-177 at different temperatures // Journal of Solid State Chemistry. – 2019. – №269 – P. 320–327.
10. Abruzzi R. C., Pires M. J. R., Dedavid B. A., Galli C. F. Application of SnO₂ Nanoparticles and Zeolites in Coal Mine Methane Sensors // Materials Research. – 2019. – №22 (Suppl1). – P. e20180818
11. Torrez-Herrera J., Korili S., Gil A. Development of ceramic-MOF filters from aluminum saline slags for capturing CO₂ // Powder Technology. – 2023. – №429. – P.118962.
12. Chauhan P., Kaushik S., Tyagi S. K. A review on thermal performance enhancement of green cooling system using different adsorbent/refrigerant pairs // Energy Conversion and Management: X. – 2022. – №14. – P.100225.
13. Hoseinpoori S. Steady-state modeling of co-adsorption phenomena in direct air carbon-capture system using the IAST. – Italy: Politecnico Di Milano, 2020. – 192 p.
14. Climeworks AG. Journey toward net zero with Climeworks' carbon removal service. – 2023.
15. Qasem N. A., Ben-Mansour R., Habib M. A. An

efficient CO₂ adsorptive storage using MOF-5 and MOF-177 // *Applied Energy*. – 2018. – №210. – P.317-326.

16. **Ya J., Yong J., Liu W., Zhang X., Jiang L.** Thermodynamic analysis on direct air capture for building air condition system: Balance between adsorbent and refrigerant // *Energy and Built Environment*. – 2023. – № 4 (4). – P.399-407.

17. **Leonzio G., Fennell P. S., Shah N.** A Comparative Study of Different Sorbents in the Context of Direct Air Capture (DAC): Evaluation of Key Performance Indicators and Comparisons // *Applied Sciences*. – 2022. – Vol. 12, No. 5. – P. 2618.

18. **EnergyPlus.** Weather Data by Region: Europe WMO Region 6: Ukraine. – 2024.

Отримана в редакції 12.12.2023, прийнята до друку 19.12.2023

Technoeconomic analysis of direct air capture in the climatic conditions of Ukraine

Polina Skrypnyk^{1✉}, **Volodymyr Sereda**²

¹⁻²National Technical University of Ukraine «Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute», 6 Politekhnichna str., Kiev, 03056, Ukraine

✉ e-mail: ¹polinaskrypnyk2@gmail.com

ORCID: ¹<https://orcid.org/0009-0009-3588-759X>; ²<https://orcid.org/0000-0002-4645-3123>

This paper presents the results of research conducted to determine the optimal operating conditions for a carbon dioxide capture system for the climate conditions of Ukraine. Carbon dioxide capture is critical for maintaining climate stability, given the threat of global change caused by the increasing concentration of greenhouse gases in the atmosphere. The carbon-negative technology of capturing carbon dioxide from the air using solid sorbents is a possible and promising option for mitigating climate change in Ukraine. The paper describes the stages of operation of an air contactor with 'switching' between the adsorption and desorption phases by heating and cooling the sorbent. The chemical and physical properties of the promising sorbents Zeolite13X and MOF-177 are presented. A schematic diagram and a mathematical model of carbon dioxide capture using solid sorbents have been developed. The model takes into account the thermodynamic aspects of adsorption and desorption in an air contactor. It is shown that the adsorption capacity of sorbents, air flow rate and desorption temperature are the key factors that affect the performance and operating costs of the system. The integral annual average values of the adsorption capacity of sorbents for the temperature zone of Kyiv were determined. It was found that the most energy-consuming stage of the system is heating the sorbent to the desorption temperature. The optimal values of the desorption temperature (100 °C), the a rate to the contactor (from 1 to 2 m³/s), and the adsorption duration (3.1 hr for Zeolite13X and 0.12 hr for MOF-177) were selected. Under such conditions, 1 air contactor with MOF-177 can capture 6.67 tonnes of carbon dioxide per year, and Zeolite13X - 30.15 tonnes per year. At the same time, the cost of capturing 1 tonne of carbon dioxide is \$919 for MOF-177 and \$113 for Zeolite13X.

Keywords: Decarbonisation; Key performance indicators; Solid sorbents; Techno-economic analysis; Carbon dioxide capture from air.

References

1. **IPCC** (2023) AR6 Synthesis Report: Climate Change 2023.
2. **Environmental of Ukraine** (2023) In: *Facebook*.
3. **National Energy Technology Laboratory** (2023) Carbon dioxide capture approaches. *Gasifipedia*, 9.2.
4. **Ozkan M., Nayak S. P., Ruiz A. D., Jiang W.** (2022) Current status and pillars of direct air capture technologies. *iScience*, 25 (4), 103990.
5. **Beuttler C., Charles L., & Wurzbacher J.** (2019) The Role of Direct Air Capture in Mitigation of Anthropogenic Greenhouse Gas Emissions. *Frontiers in Climate*, 1.
6. **BASF.** (2020) 13X Molecular Sieve: Technical Data Sheet. *Rev.08*.
7. **Aljamali N. M., Abadi A., Alfatlawi I. O., Ma N.** (2019) Review on Organic Ligands with Their Various Applications. *International Journal of Chem-informatics Research*, 5, 1, 41-54.
8. **Müller M., Lebedev O. I., Fischer R. A.** (2008) Gas-phase loading of [Zn4O(btbt)2] (MOF-177) with organometallic CVD-precursors: inclusion compounds

of the type [LnM]a@MOF-177 and the formation of Cu and Pd nanoparticles inside MOF-177. *Journal of Materials Chemistry*, №18 (43), 5274.

9. **Santos K. M. C., Santos R. J. O., De Araújo Alves M. M., De Conto J. F., Borges G. R., Dariva C., Egues S. M., Santana C. C., Franceschi E.** (2019) Effect of high pressure CO₂ sorption on the stability of metalorganic framework MOF-177 at different temperatures. *Journal of Solid State Chemistry*, 269, 320–327.

10. **Abruzzi R. C., Pires M. J. R., Dedavid B. A., Galli C. F.** (2019) Application of SnO₂ Nanoparticles and Zeolites in Coal Mine Methane Sensors. *Materials Research*, 22 (suppl 1), e20180818.

11. **Torrez-Herrera J., Korili S., Gil A.** (2023) Development of ceramic-MOF filters from aluminum saline slags for capturing CO₂. *Powder Technology*, 429, 118962.

12. **Chauhan P., Kaushik S., Tyagi S. K.** (2022) A review on thermal performance enhancement of green cooling system using different adsorbent/refrigerant pairs. *Energy Conversion and Management: X*, 14, P.100225.

13. **Hoseinpoori S.** (2020) Steady-state modeling of co-adsorption phenomena in direct air carbon-capturesystem using the IAST. *Italy: Politecnico Di Milano*, 192.

14. **Climeworks AG.** (2023) Journey toward net zero with Climeworks' carbon removal service.

15. **Qasem N. A., Ben-Mansour R., Habib M. A.** (2018) An efficient CO₂ adsorptive storage using MOF-5 and MOF-177. *Applied Energy*, 210, 317–326.

16. **Ya J., Yong J., Liu W., Zhang X., Jiang L.** (2023) Thermodynamic analysis on direct air capture for building air condition system: Balance between adsorbent and refrigerant. *Energy and Built Environment*, 4 (4), 399-407.

17. **Leonzio G., Fennell P. S., Shah N.** (2022) A Comparative Study of Different Sorbents in the Context of Direct Air Capture (DAC): Evaluation of Key Performance Indicators and Comparisons. *Applied Sciences*, 12, 5, 2618.

18. **EnergyPlus.** (2024) Weather Data by Region: *Europe WMO Region 6: Ukraine*.

Received 12 December 2023

Approved 19 December 2023

Available in Internet 02 January 2024