Стратегия развития: будущее европейского катализа

Сулимов А.В.,
Орлов А.В.,
Сергеев С.Ф.,
Овчарова А.В.
Нижегородский государственный
технический университет им. Р.Е. Алексеева,
Нижний Новгород,

Sulimov A.V.,
Orlov A.V.,
Sergeev S.F.,
Ovcharova A.V.
Nizhny Novgorod State
Technical University n.a. R.E.Alekseev,

E-mail: epoxide@mail.ru

Подавляющее большинство химических процессов, активно эксплуатирующихся в промышленных масштабах, являются каталитическими. В связи с этим в современных условиях сложно переоценить роль катализатора. Сейчас катализ является одной из наиболее динамично развивающихся отраслей, которую с уверенностью можно назвать двигателем устойчивого развития химического направления. Жесткие требования экологического и экономического характера диктуют настоятельную необходимость создания новых, эффективных, экологически чистых и ресурсосберегающих технологий. Успешный дизайн таких процессов напрямую зависит от катализатора, от его природы, способности селективно ускорять целевые реакции, времени жизни, возможности реактивации и рециркуляции. На заре становления данного направления к каталитически активным контактам применялось только одно требование — катализатор должен ускорять реакцию, то на сегодняшний день катализатор это «умная» система. Такие контакты должны селективно ускорять целевые реакции, быть технологичными, легко отделяться от реакционной массы и реактивироваться, они должны быть экологичными и не создавать трудностей, связанных с их утилизацией. В этой связи исследование данного направления является актуальной задачей. В обзоре рассматривается инициатива Европейской комиссии по активизации деятельности в области катализа — ключевого направления будущего устойчивого развития Европы. Обсуждается тематический европейский кластер по катализу и его основной результат — Европейская дорожная карта по науке и технологии европейского катализа.

Ключевые слова: катализ, катализатор, возобновляемые источники сырья, циркуляционная экономика, энергоэффективность, перспективные технологии.

DEVELOPMENT STRATEGY: THE FUTURE OF EUROPEAN CATALYSIS

The vast majority of chemical processes that are actively used on an industrial scale are catalytic. In this regard, in modern conditions it is difficult to overestimate the role of the catalyst. Now catalysis is one of the most dynamically developing industries, which can surely be called the engine of sustainable development in the chemical field. Strict environmental and economic requirements dictate the urgent need to create new, efficient, environmentally friendly and resource-saving technologies. The successful design of such processes directly depends on the catalyst, on its nature, the ability to selectively accelerate target reactions, the lifetime, the possibility of reactivation and recycling. At the dawn of the development of this

direction, only one requirement was applied to catalytically active contacts — the catalyst must accelerate the reaction, now the catalyst is a «smart» system. Such contacts should selectively accelerate target reactions, be technologically advanced, easily separated from the reaction mass and reactivated, they should be environmentally friendly and not create difficulties associated with their disposal. In this regard, the study of this direction is an urgent task. The review examines the initiative of the European Commission for the revitalization of catalysis, a key direction for the future sustainable development of Europe. The thematic European cluster on catalysis is discussed and its main result is the European roadmap on science and technology of European catalysis.

Keywords: catalysis, catalyst, renewable sources of raw materials, circulation economy, energy efficiency, promising technologies.

Введение

На современном этапе своего развития, как впрочем, и в относительно недавнем прошлом химическая промышленность была мощным двигателем индустриального, социального и экономического развития общества и государства в целом. С другой стороны, постоянное стремление исследователей, инженеров к использованию новых типов сырья и передовых технологий способствовало развитию и самой химической отрасли. Однако ряд событий имевших место быть как в государственном устройстве, так и в обществе в целом определяли наличие экономических циклов и переходных периодов [1]. По мнению экспертов Европейского союза, на сегодняшний день есть довольно много предпосылок, свидетельствующих о том, что мы находимся в очередном переходном периоде развития химического производства [2,3]. История убедительно показывает, что некогда успешные предприятия, не сумевшие своевременно адаптироваться к изменяющимся рыночным условиям, быстро теряли свои лидерские позиции зачастую полностью уходя в небытие. В этой связи особую актуальность приобретают вопросы сохранения конкурентоспособности химической промышленности. А обеспечение ее устойчивого развития в отдаленной перспективе требует определенных усилий уже на текущем этапе [4]. Сегодня на наше общество глубоко влияют передовые материалы и современные технологии, о которых в прошлом даже и не задумывалось человечество. Они помогли повысить уровень нашей жизни и открыть перед нами новые горизонты. Достижения последних десятилетий ставят новые задачи перед человечеством. Ключевым элементом успеха в будущем является разработка новых материалов и технологий уже в настоящем. Сложность все больше проникает в наш мир и простые механические технологии все чаще заменяются невидимыми и интеллектуальными материалами и технологиями с индивидуальными свойствами. Парадоксальность ситуации заключается еще и в том, что производителям химических продуктов приходится конкурировать не только на рынке производимой продукции, но и в сырьевом сегменте. Количество природных ресурсов не безгранично, рациональное и эффективное использование сырьевых источников становится очень актуальным. Все это диктует настоятельную необходимость прогнозирования потребностей науки и техники, которые могут поддерживать конкурентоспособность в этой стратегической области на долгие годы.

Одним из эффективных рычагов оптимизации и разработки новых химических процессов, имеющий неограниченный потенциал роста, является катализ.

Современная роль катализа

Катализ является давним фактором, обеспечивающим устойчивость и конкурентоспособность химического вектора, и по этой причине он играет ключевую роль в формировании будущего данного направления. Катализ помимо того, что играет решающую роль во многих существующих экологически чистых технологиях, он является одним из самых перекрестных и ключевых дисциплин в химической технологии. Каталитические материалы имеют важное значение для уменьшения

экологических нагрузок. Различные каталитические системы, применяемые в химической промышленности, помогают сделать продукцию более экологически чистой, сократить выбросы CO_2, решить ряд энергетических проблем.

Катализаторы и каталитические процессы прямо или косвенно относятся к 20-30% мирового ВВП [5]. Производство катализаторов в Европе имеет важное экономическое значение. Суммарный объем европейского рынка катализаторов на 2012 г. оценивался примерно 16.3 млрд. долларов. Ожидается, что глобальный рынок катализаторов к 2024 году достигнет 34,3 млрд. долларов (средний годовой темп роста составит 3,5%) [6].

Из 50 крупнейших химических веществ, производимых в настоящее время, 30 производятся с использованием каталитических технологий. Ежегодный совокупный объем выбросов углекислого газа в атмосферу от наиболее крупных предприятий, производящих эти 50 веществ составляет более 20 миллиардов тонн. На производство 18 продуктов приходится около 80% спроса на энергию и 75% выбросов парниковых газов [7].

По оценкам IEA [7] оптимизация существующих и применение новых каталитических систем и связанных с ним процессов могут снизить энергоемкость этих продуктов на 20-40%. В абсолютном выражении эти усовершенствования могут сэкономить колоссальные затраты энергии и в значительной степени уменьшить эмиссию диоксида углерода по сравнению со сценарием «как обычно».

«Зеленая» и устойчивая будущая экономика резко зависит от прорывных открытий в области катализа, которые направлены на повышение энергоэффективности существующих процессов и повышения их экологичности. В текущем переходе от ископаемого топлива к возобновляемому сырью катализатор может играть ключевую роль на различных технологических этапах. Катализ является самым междисциплинарным и всеобъемлющим фактором в химической промышленности. Подтверждением тому является тот факт, что для эффективного проведения каталитического процесса требуется его исследование в многомерном масштабе, от уровня единичной молекулярной реакции на каталитически активном участке (нм-шкала) до нескольких метров — масштаб промышленного каталитического реактора.

Кроме того, катализ охватывает несколько стратегических секторов (от энергетического до производства материалов и продуктов питания), включая его одну из важных ролей в области охраны окружающей среды (защита от промышленных и муниципальных выбросов, квалифицированная утилизация отходов и пр.). Развитие катализа и разработка новых энергоэффективных, экологически чистых и ресурсосберегающих технологий является ключевым звеном экономики, обеспечивающим стабильный рост и устойчивость химической промышленности в целом.

Европа является ведущим игроком как в академических исследованиях по катализу, так и в промышленном внедрении катализаторов, но это лидерство все более ослабевает в условиях стремительно растущих экономик, таких как Китай, или зрелых, но все еще инновационных экономик, таких как США или Япония. Европейское лидерство в области катализа постепенно ослабляется все еще существующей разрозненностью, недостаточной координацией между мероприятиями общеевропейского характера и мероприятиями отдельных стран этого региона, иногда резким сокращением средств для фундаментальных исследований во многих европейских странах и отсутствием крупномасштабных инфраструктур, посвященных катализу.

Чтобы справиться с этими проблемами и решить эти и дальнейшие стратегические задачи для Европы, Европейская комиссия запустила тематический европейский кластер по катализу [8], объединив проекты, финансируемые ЕС, и другими заинтересованными сторонами в этой и тесно

связанных областях. Основная цель этой стратегической кластерной инициативы — лучше интегрировать фрагментированные мероприятия в Европе, создавая синергию между проектами, финансируемыми ЕС, и другими участниками, а также предоставить информацию о будущих исследовательских потребностях в Европейскую комиссию.

Европейский кластер по катализу

Кластер, в который входят более 450 ученых со всей Европы, рассматривается как открытая и динамично развивающаяся платформа, доступная всем игрокам и заинтересованным сторонам, как из академических кругов, так и инженерно-технических работников, деятельность которых направлена на катализ и его применение [8].

Помимо составления всеобъемлющего Компендиума [9] всех финансируемых Европейским союзом проектов в области катализа, координации и интеграции деятельности участников ЕС, одним из основных результатов Кластера была подготовка единого документа «Европейской Дорожной карты по науке и технологии катализа. Путь к созданию устойчивого будущего». Проект «дорожной карты» был предметом широких консультаций и согласований, в которых участвовали многие университеты, организации, компании и даже отдельные ученые со всей Европы. В настоящее время «дорожная карта» европейского катализа опубликована [10]. Мировому научному сообществу она была представлена на обсуждение на различных научных мероприятиях (например, на 6th European Association for Chemical and Molecular Sciences (EuCheMs) — the European Conference on Chemistry; Seville, Spain, Sept. 2016 и 16th International Congress on Catalysis (ICC) — the world conference on catalysis, Beijing, China July 2016).

Европейская дорожная карта по науке и технологии катализа

Разработанная «дорожная карта» охватывает три основных направления. Первая часть посвящена анализу современного состояния и возможным сценариям развития химического производства. Стоит отметить, что в этой части проводится более широкое рассмотрение вопросов химической технологии, не ограничивающихся только известными каталитическими процессами. Основной упор делается на переход на возобновляемые источники сырья и энергии и в этой связи определяются основные пути трансформации и обсуждаются критические элементы, характеризующие изменение. Этот раздел представляет общий интерес для всех исследователей химии и энергетики и ниже он будет рассмотрен более подробно.

Вторая часть «Дорожной карты» посвящена выявлению фундаментальных целей в области каталитической химии. Основные задачи, которые обсуждаются в этом разделе, могут быть сформулированы следующим образом:

1) катализ для решения эволюционирующих энергетических и химических задач;

2) катализ для более чистого и устойчивого будущего;

3) разработка комплексных катализаторов селективного действия (совершенствование и дизайн новых катализаторов, понимание катализаторов как на микро-, так макроуровне, расширение концепций катализа).

Третья часть посвящена стратегическим исследованиям и плану реализации фундаментальных задач в области катализа. Этот раздел, в частности, основан на уже существующих дорожных картах и документах по катализу, среди которых стоит упомянуть «Научная и технологическая дорожная карта для катализа в Нидерландах» [11] и «Дорожная карта исследований катализа в Германии», [12], разработанные соответственно в Нидерландах и Германии.

Эта третья часть согласовала, объединила и обновила существующие «дорожные карты».

Безусловным достижением этого раздела является контекстуализация каталитического направления в более общей перспективе для Европы. Это должно способствовать более глубокому взаимодействию и интеграции академических и производственных кругов из разных частей ЕС. «Дорожная карта» нацелена на то, чтобы лучше определить приоритеты и задачи будущих исследований по катализу и подчеркнуть его влияние на общество и устойчивое промышленное производство в Европе. Связанная с этим цель заключается в максимизации социальных и экологических последствий путем разработки улучшенных каталитических материалов и процессов. Чтобы справиться с этими задачами, необходимо стимулировать и усиливать синергию между результатами фундаментальных исследований и их последующим технологическим воплощением. Релевантные аспекты, рассматриваемые здесь, включают интеграцию новых каталитических материалов, молекулярной химии и биологических наук. Успешная реализация новых каталитических решений и технологий требует интеграции (междисциплинарный подход) знаний и опыта из фундаментальных областей (химии, физики, биологии, математики и т. д.) в прикладную (промышленную химия и т. д.). Интеграция априорного теоретического моделирования с исследованиями in situ / operando для понимания механизмов реакции, подготовка катализаторов на наномасштабном уровне, современная микрокинетика и моделирование реактора являются примерами текущих тенденций в катализе, которые необходимо перевести на более высокий уровень. Другая задача состоит в том, чтобы использовать единый подход для гомогенного, гетерогенного и биокатализа. Все эти аспекты являются элементами общей проблемы «каталитического дизайна».

Долгосрочная перспектива для развития катализа

В настоящее время область катализа переходит от описания к предсказанию. Востребован более рациональный подход к разработке новых каталитических материалов для химических процессов. Важными элементами такого подхода являются компьютерное моделирование каталитических процессов и передовые синтетические подходы, направленные на сборку катализаторов на молекулярном уровне.

Первый раздел «Дорожной карты» представляет собой долгосрочное видение, основанное на анализе развития химических производств. Он определяет долгосрочные стратегические цели, но затрагиваемые в этом разделе вопросы во многом лежат вне самого катализа. Здесь определены следующие основные факторы устойчивого развития химического и энергетического секторов:

1. Изменение взаимосвязей энергетической химии [13] — необходимость перехода к возобновляемым источникам энергии (солнечная энергия, энергия ветра, воды и пр.) и уменьшение доли углеродсодержащего сырья, используемого в энергетических целях, более широкое использование возобновляемого растительного сырья.

2. Изменение системы хранения энергии, переход на новый уровень химического хранения энергии, позволяющий вести торговлю возобновляемыми источниками энергии в мировом масштабе [14].

3. Новая организация нефтеперерабатывающих заводов, биоперерабатывающих заводов и биозаводов. [15]

4. Использование водорода в качестве возобновляемого источника энергии и повышение роли CO_2 в качестве ключевого источника углерода.

5. Увеличение роли метанола, не только как важнейшего продукта химической технологии, но и широкое его использование как источника энергии.

6. Использование новых возможностей — химию сланцевого газа и биогазовую химию.

7. Солнечная химия (солнечные панели, фотоэлементы и пр.).

Последний пункт — это область, также обсуждаемая в недавнем документе EuCheMS и Deutsche Forschungs-gemeinschaft (DFG, Немецкий исследовательский фонд) как видение будущего устойчивого развития химии [16].

Для реализации представленных выше задач, требуются не только новые катализаторы, но также и новые технологии, материалы и процессы. В качестве фонового лейтмотива для многих из этих тем есть возможность перехода к циркуляционной и симбиотической экономике, которая сводит к минимуму использование энергии ископаемого топлива, сырья и практически исключает выбросы углекислого газа. Последний может стать кроссовером новой циркуляционной экономики, которая уже начинает появляться и на промышленном уровне.

В «дорожной карте» описывается видение будущего, а также ряд приоритетов и пробелов в науке и технике для его реализации. Среди краткосрочных аспектов существует настоятельная необходимость энергетической трансформации, которая может быть привлекательной возможностью для бизнеса при условии ее правильной организации. Примером может служить внедрение энергетического сектора на основе CO_2, который позволит создать систему торговли возобновляемыми источниками энергии во всем мире с потенциальным эффектом сокращения выбросов различных парниковых газов, что, к тому же, будет способствовать улучшению экологической обстановки и стабилизации климата.

В более долгосрочной перспективе необходимо пересмотреть химические процессы, чтобы свести к минимуму использование ископаемых видов топлива особенно с точки зрения возможности применения возобновляемых источников энергии. Это означает, что для разработки новых процессов, обусловленных нетрадиционными триггерами, такими как электроны, фотоны, излучения, генерируемые плазмой, реактивные частицы и др., потребуется, например, концептуально новый тип катализаторов, который способен избирательно контролировать пути реакции в присутствии этих высокоэнергетических систем. Выделение энергии будет фактором устойчивого развития в дополнение к селективности по отношению к углероду и по этой причине требуются новые подходы в дизайне катализаторов. В среднесрочной перспективе необходимы новые каталитические материалы для эффективной переработки солнечного света и технологий преобразования возобновляемого сырья, при этом биомасса находит свою нишу в качестве источника биотоплива и зеленых материалов.

Выводы

Рассмотренные вопросы четко указывают на необходимость переосмысления катализа для решения этих новых задач. В «дорожной карте» подчеркивается важность индивидуального подхода к созданию новых материалов с целью более глубокого понимания механизма работы катализатора на молекулярном уровне. Это позволит ускорить движение к разработке каталитических систем, способных более эффективно выполнять каталитические функции с учетом всевозрастающих экологических требований.

Разработанная «дорожная карта» и деятельность Европейского кластера катализа [8], подкрепленная исследованиями и инновациями DG (Директивные промышленные технологии) Европейской комиссии, имеют амбициозную цель — определить новый путь для создания устойчивого будущего, посредством катализа, особенно в отношении целей Horizont 2020 (H2020, Рамочная программа ЕС по исследованиям и инновациям), но не ограничивается только этим аспектом. Этот процесс будет проходить снизу вверх, поскольку он начинается с национальных «дорожных карт» и материалов по всей Европе с участием научных кругов, промышленности и различных организаций. Результатом является более широкое видение и определение стратегий

решения задач, стоящих перед промышленностью и обществом в настоящий промежуток времени.

Это отражается на растущей значимости катализа не в качестве инструмента, а в качестве одной из проблем и стимулирующих факторов для достижения общественных целей и общей цели «революции промышленного производства» и связанных с ней областей: карбонизация и энергетика, циркуляционная экономика. Катализ имеет решающее значение для более эффективного использования ресурсов (сырья, воды и т. д.) и энергии (включая возобновляемые источники энергии) и для реализации циркуляционной экономики путем минимизации отходов и максимального использования ресурсов, включая повторное использование двуокиси углерода. Все эти аспекты подробно отражены в «дорожной карте», которая, таким образом, становится способом совместного (общеевропейского) исследования и направлена на создание предпосылок реального индустриального возрождения. Одновременно она также способствует решению социальных и экологических проблем, создавая необходимые предпосылки перехода от линейной модели экономики к циркуляционной.

Список литературы

1. Cavani F., Centi G., Perathoner S., Trifir F. Sustainable Industrial Chemistry: Principles, Tools and Industrial Examples. Weinheim: Wiley-VCH, 2009.
2. Valencia R.C. The Future of the Chemical Industry by 2050. Weinheim: Wiley-VCH, 2013.
3. Stolten D., Scherer V. Transition to Renewable Energy Systems. Weinheim: WileyVCH, 2013.
4. Lanzafame P., Centi G., Perathoner S. Catalysis for biomass and CO_2 use through solar energy: opening new scenarios for a sustainable and low-carbon chemical production. Chem. Soc. Rev. 2014. vol. 43. P. 7562–7580.
5. The European Chemical Industry Council (CEFIC), European chemistry for growth. Unlocking a competitive, low carbon and energy efficient future. Bruxelles: Cefic, 2013.
6. R. Starling, Hydrocarbon Eng. URL: https://www.energyglobal.com/downstream/refining/
7. 09062016/catalyst-market-to-reachus343-billion-by-2024—3488/ (дата обращения: 09.11.2018).
8. International Energy Agency (IEA), Technology Roadmap. Energy and GHG Reductions in the Chemical Industry via Catalytic Processes. Paris: IEA, 2013.
9. European Cluster of Catalysis. URL: http://www.catalysiscluster.eu (дата обращения: 13.11.2018).
10. Catalysis Cluster-Compendium. URL: http://www.catalysiscluster.eu/nanocatalyst-cluster-compendium (дата обращения: 12.10.2018).
11. European Roadmap on Science and Technology of Catalysis. A path to create a sustainable future. URL: http://http://www.suschem.org/cust/documentrequest.aspx?DocID=1062 (дата обращения: 21.10.2018).
12. Catalysis-Key to a Sustainable Future Science and Technology Roadmap for Catalysis in the Netherlands. URL: http://http://www.niok.eu/en/wp-content/files/catalysis-key-to-a-sustainable-future-web1.pdf. (дата обращения: 02.11.2018).
13. Roadmap for Catalysis Research In Germany. Catalysis. A Key Technology for Sustainable Economic Growth. URL: https://dechema.de/dechema_media/Katalyse_Roadmap_2010_en-p-3334-view_image-1called_by-dechema-original_site-dechema_eV-original_page124930.pdf. (дата обращения: 14.11.2018).
14. Abate S., Centi G., Lanzafame P., Perathoner S. The energy-chemistry nexus: A vision of the future from sustainability perspective. J. Energy Chem. 2015. vol. 24. P. 535–547.
15. Abate S., Centi G., Perathoner S. Chemical energy conversion as enabling factor to move to a renewable energy economy. Green. 2015. vol. 5. P. 43–54.
16. Abate S., Lanzafame P., Perathoner S., Centi G. New Sustainable Model of Biorefineries: Biofactories and Challenges of Integrating Bio-and Solar Refineries. ChemSusChem. 2015. vol. 8. P.

2854–2866.
17. EuCheMS (The European Federation of Catalysis Societies), White Paper on Solar-driven Chemistry. URL: http://www.euchems.eu/solar-driven-chemistry (дата обращения: 26.10.2018).