SB2DAC

Superbases towards CO2 uptake - Direct Air Capture

Programm / Ausschreibung	Energieforschung (e!MISSION), Energieforschung, Energieforschungsprogramm 2023	**Status**	laufend
Projektstart	01.10.2024	**Projektende**	31.12.2025
Zeitraum	2024 - 2025	**Projektlaufzeit**	15 Monate
Keywords	CO2, direct air capture, amine-based adsorbent		

Projektbeschreibung

Dieses Projekt fokussiert sich auf die Herausforderung, neue Materialien für negative Emissionstechnologien zu entwickeln. Mit diesen Materialien kann CO2 direkt aus der Umgebungsluft (DAC) gebunden werden, wobei es derzeit noch schwierig ist, ein Gleichgewicht zwischen Effizienz und Kosten zu finden. Neue DAC-Materialien sollten daher kostengünstig, einfach und schnell hergestellt werden können. Üblicherweise werden aliphatische Amine verwendet, um Hybridadsorbentien auf Basis teurer anorganischer Oxide und Polymerträger herzustellen. Aliphatische Amine weisen jedoch eine geringe Stabilität und unzureichende Wirkungsgrade bzw. Selektivitäten gegenüber CO2 im Vergleich zu Feuchtigkeit und anderen sauren Komponenten in der Luft wie z. B. Schwefeldioxid und Stickoxide auf.
Daher wird im Rahmen dieses Projekts Abfall-PVC als günstiger Rohstoff und organische Superbasen (SB) verwendet, um DAC-Materialien durch Upcycling zu erhalten. Die Cl-Gruppen im PVC können dafür durch N-haltige Nukleophile – bzw. im konkreten Fall „Superbasen“ - ausgetauscht werden, wodurch das Polymergerüst durch nukleophilen Austausch modifiziert wird. Anstelle der üblicherweise verwendeten aliphatischen Amine wird eine Imidin-Superbase (SB) mit sehr hoher Basizität verwendet, die spontan einen stabilen und isolierbaren zwitterionischen Komplex mit CO2 bildet. Eine optimale Oberflächenfunktionalisierung mit Superbasen wird dabei durch die Variation der Reaktionsbedingungen (Temperatur, Zeit,…) erreicht. Die neuen Materialien sind günstig, da Plastikabfall anstelle von neu synthetisierten anorganischen Oxiden und Polymerträgern als Rohstoff verwendet wird. Zusätzlich zur CO2-Abscheidung, wird in diesem Projekt eine weitere CO2 Reduktion durch das Recycling von Abfall-PVC anstelle der Verwendung neuer Rohstoffe erreicht.
Die entwickelten SB-PVC Materialien werden durch Messung der CO2-Adsorptionskapazität, der Amin-Effizienz (molares CO2/N-Verhältnis), sowie durch deren Stabilität charakterisiert. Als Referenzmaterial wird Polyethylamin anstelle von SB auf PVC immobilisiert. Um die Fähigkeit von PVC-SB zur CO2-Aufnahme bei verschiedenen Konzentrationen unter verschiedenen Feuchtigkeits- und Temperaturbedingungen zu überprüfen, wird die Infrarot-Reflexionsabsorptionsspektroskopie angewendet. Durch die Analyse der Schwingungsspektren kann der Mechanismus der CO2-Adsorption bzw. die Interaktion mit den SB-Stellen abgeleitet werden.
Um die Anforderungen von DAC-Materialien zu erfüllen, muss die CO2-Desorption mit minimaler Energie möglich sein. SB benötigen aufgrund der Reversibilität bei niedrigeren Temperaturen weniger Energie für die Regeneration als aliphatische Amine, was die Reduktion der Betriebskosten ermöglicht. Die Desorptionstemperatur wird voraussichtlich < 100 °C

betragen. Eine vorläufige techno-ökonomische Analyse wird durchgeführt, um den Wirkungsgrad, die Regenerationsenergie, die Haltbarkeit und Stabilität sowie die Materialkosten zu bewerten. Im Falle einer Fortsetzung dieses Projekts werden eine detailliertere wirtschaftliche Bewertung, die wirtschaftliche Lebensfähigkeit sowie Umwelt- und Sozialaspekte evaluiert.

Abstract

This project addresses the challenge of negative emission technologies of designing materials to capture CO2 directly from ambient air (DAC) with the balance between efficiency and expenses. The DAC materials should be prepared in a cost-effective, facile, and fast pathway. The aliphatic amines are commonly used to prepare hybrid sorbents based on costly inorganic oxides and polymer supports. However, aliphatic amines are of low stability and insufficient capture efficiency and selectivity towards CO2 vs moisture and other acidic components in the air (sulfur dioxide and nitrogen oxides).
Therefore, this project suggests the use of waste PVC as a feedstock and organic superbases to create DAC materials by upcycling. The Cl moieties can be exchanged by N-containing nucleophiles - superbases, thereby modifying the polymer backbone by nucleophilic substitution. Instead of commonly used aliphatic amines, imidine superbase (SB), having a very high basicity, will spontaneously form a stable and isolable zwitterionic complex with CO2, which is stable at room temperature in the solid state or in solution. The SB grafting will be optimized by reaching the high SB loading by variation of temperature and time of reaction. The proposed materials are cost-effective because plastic waste is used as a feedstock instead of newly synthesized inorganic oxides and polymer supports. Simultaneously, CO2 reduction is facilitated within this project via the upcycling of waste PVC instead of primitive strategies of waste management. PVC waste specifically requires upcycling due to the presence of chlorine in its structure, which can evolve during landfilling or incineration at abnormally high temperatures> 1100 °C.
Prepared materials PVC-SB will be characterized by measurements of CO2 adsorption capacity, amine efficiency (molar CO2/N ratio) and stability. For comparison, polyethylene amine will be grafted onto PVC instead of SB. To verify the ability of PVC-SB to capture CO2 in different concentrations at different moisture and temperatures, Infrared Reflection Absorption Spectroscopy (IRAS) will be applied. By analyzing the vibrational spectra, one can deduce the mechanism of CO2 adsorption and interaction with the SB sites.
To meet the requirements of DAC materials, CO2 desorption needs to require minimum energy. SB requires lower energy for regeneration because of reversibility at lower temperatures than those required for aliphatic amines, facilitating a reduction of the operational costs. The desorption temperature is expected to be < 100 °C. The preliminary techno-economic analysis - Technical Assessment step will be performed to evaluate Capture Efficiency, Regeneration Energy, Durability and Stability and Cost of Materials. In the case of continuation of this project, more detailed Economic Assessment, Economic Viability and Environmental and Social Considerations will be performed.

Projektpartner

- Technische Universität Wien