



(12) BẢN MÔ TẢ SÁNG CHẾ THUỘC BẰNG ĐỘC QUYỀN SÁNG CHẾ

(19) Cộng hòa xã hội chủ nghĩa Việt Nam (VN)
CỤC SỞ HỮU TRÍ TUỆ

(11)



1-0031827

(51)⁷ B01J 20/18; C01B 39/48

(13) B

(21) 1-2017-00167

(22) 19/06/2015

(86) PCT/US2015/036601 19/06/2015

(87) WO 2015/196026 23/12/2015

(30) P201430935 20/06/2014 ES

(45) 25/05/2022 410

(43) 27/03/2017 348A

(73) EXXONMOBIL RESEARCH AND ENGINEERING COMPANY (US)

1545 Route 22 East, P.O. Box 900, Annandale, NJ 08801-0900, United States of America

(72) CORCORAN, Edward, W., Jr. (US); KORTUNOV, Pavel (RU); PAUR, Charanjit, S. (US); RAVIKOVITCH, Peter, I. (US); WANG, Yu (CN); CORMA CANOS, Avelino (ES); VALENCIA VALENCIA, Susana (ES); REY GARCIA, Fernando (ES); CANTIN SANZ, Angel (ES); PALOMINO ROCA, Miguel (ES).

(74) Công ty TNHH dịch vụ sở hữu trí tuệ DREWMARKS (DREWMARKS CO.,LTD.)

(54) PHƯƠNG PHÁP HẤP PHỤ VÀ LƯU TRỮ CÁC CHẤT LƯU

(57) Sáng chế đề cập đến phương pháp hấp phụ và lưu trữ chất lưu, trong đó vật liệu tinh thể có lỗ rỗng li ti có bản chất là zeolit mà, ở trạng thái đã nung và không có các khuyết tật trong ma trận tinh thể của nó được biểu hiện bởi sự có mặt của các silanol, có công thức thực nghiệm

$x (M_{1/n}XO_2): y YO_2: g GeO_2: (1-g) SiO_2$

trong đó

M được chọn trong số H⁺, ít nhất một ion dương vô cơ có điện tích +n, và hỗn hợp của cả hai,

X là ít nhất một nguyên tố hóa học có trạng thái oxi hóa +3,

Y là ít nhất một nguyên tố hóa học có trạng thái oxi hóa +4, khác Si

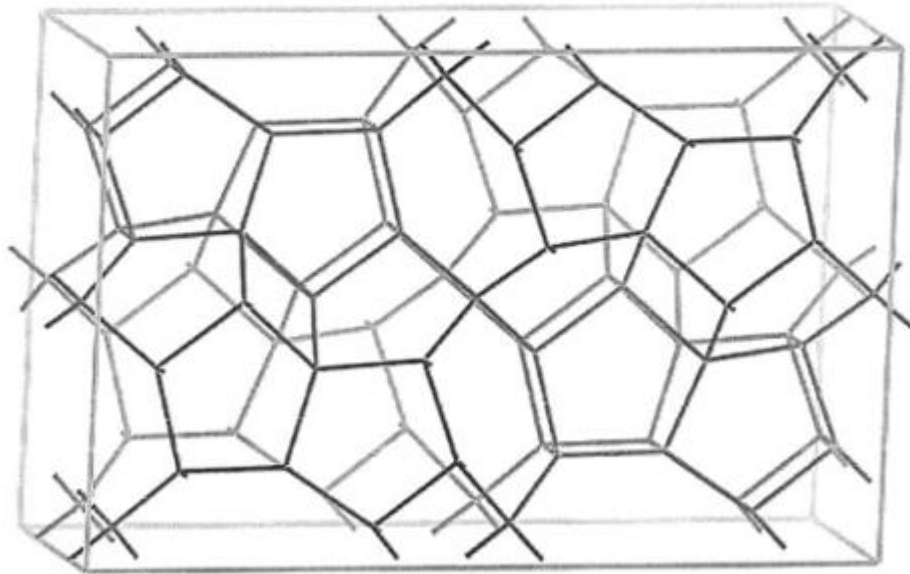
x có trị số nằm trong khoảng 0 và 0,2, bao gồm cả 0 và 0,2,

y có trị số nằm trong khoảng 0 và 0,1, bao gồm cả 0 và 0,1,

g có trị số nằm trong khoảng 0 và 0,5, bao gồm cả 0 và 0,1,

mà được kí hiệu là ITQ-55, cũng như phương pháp điều chế của nó. Sáng chế cũng đề cập đến việc sử dụng vật liệu tinh thể có bản chất là zeolit để hấp phụ các thành phần chất lưu, phân tách bằng màng các thành phần chất lưu, lưu trữ các thành phần chất lưu và xúc tác các phản ứng chuyển hóa khác nhau.

Cấu trúc khung của ITQ-55 chỉ thể hiện các nguyên tử tứ diện.
Ô đơn vị mà có các cạnh được xác định bằng hộp màu ghi.



Lĩnh vực kỹ thuật được đề cập

Sáng chế đề cập đến lĩnh vực kỹ thuật về các vật liệu tinh thể có lỗ rỗng li ti có bản chất là zeolit, hữu ích như các chất hấp phụ, các chất xúc tác hoặc các thành phần xúc tác, cho các quy trình biến đổi và cụ thể là cho việc hấp phụ và phân tách các hợp chất hữu cơ và vô cơ trong pha khí hoặc pha lỏng.

Tình trạng kỹ thuật của sáng chế

Các zeolit là vật liệu tinh thể có lỗ rỗng li ti được hình thành bởi ma trận của khối tứ diện TO_4 mà có chung các đỉnh tạo ra cấu trúc ba chiều mà chứa các đường dẫn và/hoặc các lỗ hổng ở kích thước phân tử. Chúng là các thành phần biến đổi, và T thường đại diện các nguyên tử với số oxy hóa chính thức là +3 hoặc +4, ví dụ như Si, Ge, Ti, Al, B, hoặc Ga. Khi một vài nguyên tử T có số oxy hóa nhỏ hơn +4, ma trận tinh thể được hình thành có các điện tích âm mà được bù bởi sự có mặt của các đường dẫn hoặc các lỗ hổng của các ion dương hữu cơ hoặc vô cơ. Các đường dẫn và các lỗ hổng có thể chứa các phân tử hữu cơ và H_2O , do đó, theo cách thông thường, các thành phần hóa học của các zeolit có thể được biểu diễn bằng công thức tối giản sau đây:



trong đó M là một hoặc một vài ion dương hữu cơ và vô cơ có điện tích +n; X là một hoặc một vài nguyên tố hóa trị ba, Y là một hoặc một vài nguyên tố hóa trị bốn, thường là Si, và R là một hoặc một vài chất hữu cơ. Mặc dù bằng các phương pháp xử lý tổng hợp sau, bản chất của M, X, Y và R và các giá trị x, y, z và w có thể thay đổi, thành phần hóa học của zeolit (như vừa được tổng hợp hoặc sau khi nung) có các phạm vi đặc tính cho mỗi zeolit và phương pháp điều chế nó.

Cấu trúc tinh thể của mỗi zeolit, với hệ thống các đường dẫn và các lỗ hổng riêng biệt, tạo ra các ảnh nhiễu xạ tia X đặc trưng, mà cho phép phân biệt chúng với nhau.

Nhiều zeolit được tổng hợp trong sự có mặt của phân tử hữu cơ mà đóng vai trò như chất định hướng cấu trúc. Các phân tử hữu cơ mà đóng vai trò như các chất định hướng cấu trúc (structure director agents-SDA) thường chứa nitơ trong

thành phần của chúng, và chúng có thể tạo ra các ion dương hữu cơ ổn định trong môi trường phản ứng.

Việc huy động các loại tiền chất trong suốt quá trình tổng hợp các zeolit có thể được tiến hành trong sự có mặt của các nhóm hydroxyl và môi trường cơ bản mà có thể đưa vào như hydroxit của SDA tương tự, ví dụ như tetrapropylamoni hydroxit trong trường hợp của zeolit ZSM-5. Các ion florua có thể cũng đóng vai trò như các chất huy động trong việc tổng hợp các zeolit, ví dụ trong Patent EP-TO-337479 việc sử dụng HF được mô tả trong H₂O tại pH thấp như chất huy động của silic oxit cho việc tổng hợp zeolit ZSM-5.

Bản chất kỹ thuật của sáng chế

Sáng chế đề cập đến lĩnh vực kỹ thuật về vật liệu tinh thể có lỗ rỗng li ti có bản chất là zeolit, được xác định như “zeolit ITQ-55,” phương pháp điều chế và sử dụng nó.

ITQ-55 (VIỆN CÔNG NGHỆ HÓA HỌC số 55) là vật liệu tinh thể có lỗ rỗng li ti mới có khung của các nguyên tử tứ diện được nối bởi các nguyên tử cầu nối, khung nguyên tử tứ diện được định rõ bằng các liên kết giữa các nguyên tử được phối trí tứ diện trong khung của nó. ITQ-55 ổn định để nung trong không khí, hấp thụ hydrocarbon, và hoạt động theo cách xúc tác cho chuyển hóa hydrocarbon.

Vật liệu này, cả trong dạng được nung và dạng được tổng hợp không được nung của nó có ảnh nhiễu xạ tia X khác với vật liệu zeolit đã biết và, do đó, là đặc trưng của vật liệu này.

Trong các khía cạnh khác, vật liệu này phù hợp để sử dụng trong việc phân tách dựa trên sự hấp phụ có chọn lọc các thành phần chất lưu. Trong các khía cạnh khác, vật liệu này phù hợp để sử dụng trong phân tách bằng màng các thành phần chất lưu. Trong các khía cạnh khác, vật liệu này phù hợp sử dụng để lưu trữ các thành phần chất lưu. Trong các khía cạnh khác, vật liệu này phù hợp để sử dụng trong các phản ứng chuyển hóa xúc tác của các hợp chất hữu cơ và/hoặc khí tổng hợp.

Mô tả vắn tắt các hình vẽ

Fig.1 là hình biểu diễn ảnh nhiễu xạ tia X của các đỉnh đặc trưng nhất của

vật liệu ITQ-55 silic tinh khiết, như được tổng hợp, thu được theo ví dụ 2.

Fig.2 là hình biểu diễn ảnh mẫu nhiễu xạ tia X của các đỉnh đặc trưng nhất của vật liệu theo ví dụ 2 ở trạng thái được nung.

Fig.3 là hình biểu diễn ảnh nhiễu xạ tia X của các đỉnh đặc trưng nhất của vật liệu ITQ-55 mà chứa Al và Si trong thành phần của nó, như được tổng hợp, thu được theo ví dụ 4.

Fig.4 là hình biểu diễn độ chọn lọc hấp phụ CO₂ trên độ chọn lọc hấp phụ của metan trong vật liệu ITQ-55 ở dạng được nung, được thu được theo ví dụ 2. Độ chọn lọc được thể hiện như tỉ số của khả năng hấp phụ thu được bắt đầu từ các đường đẳng nhiệt của các khí tinh khiết.

Fig.5 là hình biểu diễn khung cấu trúc của ITQ-55 chỉ thể hiện các nguyên tử tứ diện.

Fig.6 là hình biểu diễn một phương án của bộ tiếp xúc đường dẫn song song dưới dạng nguyên khối được tạo ra trực tiếp từ chất hấp phụ có nhiều lỗ rỗng li ti và chứa nhiều đường dẫn song song.

Fig.7 là hình biểu diễn mặt cắt ngang dọc theo trục dọc của nguyên khối theo Fig.6

Fig.8 là hình biểu diễn phần được phóng to của mặt cắt ngang của nguyên khối theo Fig.7 thể hiện cấu trúc chi tiết của lớp chất hấp phụ cùng với chất chặn chiếm một số lỗ trung bình và lỗ lớn.

Fig.9 là hình biểu diễn khác của phương án bộ tiếp xúc đường dẫn song song dưới dạng nguyên khối được phủ trong đó lớp chất hấp phụ được phủ trên thành đường dẫn.

Fig.10 là hình biểu diễn phương án bộ tiếp xúc song song mà được dựng từ các tấm được dát mỏng song song.

Fig.11 là hình thể hiện kích thước của ô đơn vị cho ITQ-55 được xác định bằng các giá trị được đo và được xác định bằng việc mô hình hóa.

Fig.12 là hình thể hiện các kết quả bổ sung từ các mô hình hóa động lực phân tử liên quan đến kích thước lỗ hổng (lỗ) tối thiểu trong ô đơn vị cho ITQ-55.

Fig.13 là hình thể hiện các đường đẳng nhiệt hấp phụ tại nhiệt độ 28°C đối với các tinh thể ITQ-55 tại áp suất thấp.

Fig.14 là hình thể hiện các đường đẳng nhiệt CO_2 và N_2 cho khoảng được mở rộng của áp suất tại nhiệt độ 30°C .

Fig.15 là hình thể hiện nhiệt đồng vị của chất hấp phụ CO_2 và N_2

Fig.16 là hình thể hiện tải cân bằng N_2 theo mol mỗi kg của ITQ-55 tại nhiệt độ 5°C và 25°C .

Fig.17 là hình thể hiện tải cân bằng H_2O đối với ITQ-55 so với zeolit 5A.

Fig.18 là hình thể hiện các đường đẳng nhiệt hấp phụ tại nhiệt độ 28°C đối với C_2H_4 , Ar, Kr, và CH_4 .

Fig.19 là hình thể hiện sự so sánh giữa hấp phụ cân bằng của metan và etylen tại 1 bar (101 kPa) và tại nhiệt độ 28°C .

Fig.20 là hình thể hiện các đường đẳng nhiệt hấp phụ đối với H_2 tại áp suất lên đến 10 bar (khoảng 1 MPa) tại nhiệt độ -10°C và CH_4 tại nhiệt độ 28°C .

Fig.21 là hình thể hiện sự hấp phụ như hàm căn bậc hai của thời gian tại 1 bar (101 kPa) và tại nhiệt độ 30°C đối với CO_2 , N_2 , CH_4 , và C_2H_4 .

Fig.22 là hình thể hiện dữ liệu bổ sung liên quan đến sự hấp thu như hàm thời gian đối với N_2 , CO_2 , CH_4 , C_2H_6 , và C_2H_4 .

Các Fig.23A và 23B là các hình thể hiện các hình ảnh kính hiển vi điện tử quét (scanning electron microscopy - SEM) của các tinh thể ITQ-55.

Các Fig.24 và 25 là các hình thể hiện các nghiên cứu động học với các đáp ứng tần số đối với CH_4 và CO_2 (Fig.24) và N_2 (Fig.25) trên mẫu ITQ-55.

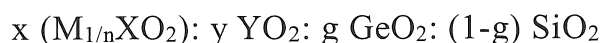
Fig.26 là hình thể hiện sự phụ thuộc nhiệt độ của hằng số thời gian khuếch tán đối với etan và etylen.

Fig.27 là hình thể hiện các kết quả ZLC đối với CO_2 trong ITQ-55.

Fig.28 là hình thể hiện các đường đẳng nhiệt hấp phụ được tính toán cho axetylen trên ITQ-55.

Mô tả chi tiết sáng chế

Thứ nhất, sáng chế đề cập đến vật liệu tinh thể có lỗ rỗng li ti có bản chất là zeolit mà có, trong trạng thái được nung và không có các khuyết tật trong ma trận tinh thể được biểu hiện bằng sự có mặt của silanol, công thức đơn giản



trong đó,

M được chọn trong số H^+ , ít nhất một ion dương vô cơ có điện tích $+n$, và hỗn hợp của cả hai, tốt hơn là được chọn trong số H^+ , ít nhất một ion dương vô cơ có điện tích $+n$ được chọn trong số các kim loại kiềm, kim loại kiềm thổ và tổ hợp của chúng, và hỗn hợp của cả hai,

X ít nhất là một nguyên tố hóa học có số oxy hóa $+3$, tốt hơn là được chọn lọc từ Al, Ga, B, Fe, Cr và hỗn hợp của chúng.

Y ít nhất là một nguyên tố hóa học có số oxy hóa $+4$, tốt hơn là được chọn lọc từ Ti, Sn, Zr, V và hỗn hợp của chúng.

x có giá trị nằm trong khoảng từ 0 đến 0,2, gồm cả 0 và 0,2, tốt hơn là nhỏ hơn 0,1.

y có giá trị nằm trong khoảng từ 0 đến 0,1, gồm cả 0 và 0,1, tốt hơn là nhỏ hơn 0,05.

g có giá trị nằm trong khoảng từ 0 đến 0,5, gồm cả 0 và 0,5, tốt hơn là nhỏ hơn 0,33.

và do vật liệu này, như được tổng hợp có ảnh nhiễu xạ tia X với, ít nhất, góc có giá trị 2θ (độ) và các cường độ tương đối (I/I_0) được thể hiện trong bảng I, I_0 là cường độ của đỉnh cao nhất mà được gán giá trị 100:

Bảng I

2θ (độ) $\pm 0,5$	Cường độ (I/I_0)
5,8	w
7,7	w
8,9	w
9,3	mf
9,9	w
10,1	w
13,2	m
13,4	w
14,7	w
15,1	m
15,4	w
15,5	w
17,4	m
17,7	m

19,9	m
20,6	m
21,2	f
21,6	f
22,0	f
23,1	mf
24,4	m
27,0	m

trong đó w là cường độ yếu tương đối nằm trong khoảng từ 0 đến 20%,

m là cường độ trung bình tương đối giữa 20 và 40%,

f là cường độ mạnh tương đối giữa 40 và 60%, và

mf là cường độ cực mạnh tương đối giữa 60 và 100%.

Vật liệu tinh thể có lỗ rỗng li ti có bản chất là zeolit theo sáng chế, sau khi được nung để loại bỏ các hợp chất hữu cơ bị giữ bên trong nó, có ảnh hưởng xạ tia X với, ít nhất, góc có giá trị 2θ (độ) và các cường độ tương đối (I/I_0) được biểu thị trong Bảng II:

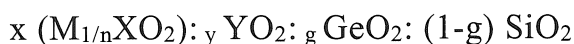
Bảng II

2θ (độ) $\pm 0,5$	Cường độ (I/I_0)
6,2	w
7,8	w
8,0	w
9,8	mf
10,0	m
10,3	w
12,3	w
13,4	w
13,7	w
15,0	w
15,2	w
16,8	w
18,1	w
20,1	w

21,3	w
23,5	w
23,9	w
26,8	w

trong đó w, m, f và mf có nghĩa như trên.

Theo phương án được ưu tiên của sáng chế vật liệu tinh thể có lỗ rỗng li ti có bản chất là zeolit ITQ-55 có trong dạng được nung và không có các khuyết tật trong ma trận tinh thể được biểu hiện với sự có mặt của silanol, công thức đơn giản



trong đó

M được chọn trong số H⁺, ít nhất một ion dương vô cơ có điện tích +n, tốt hơn là kiềm hoặc kiềm thổ, kim loại kiềm, kim loại kiềm thổ và các tổ hợp của chúng,

X ít nhất là một nguyên tố hóa học có số oxy hóa +3, tốt hơn là được chọn trong số Al, Ga, B, Fe, Cr và hỗn hợp tương tự,

Y ít nhất là một nguyên tố hóa học có số oxy hóa +4 khác Si, được chọn trong số Ti, Sn, V, Zr và các hỗn hợp tương tự,

x có giá trị nằm trong khoảng từ 0 đến 0,1, gồm cả 0 và 0,1,

y có giá trị nằm trong khoảng từ 0 đến 0,05, gồm cả 0 và 0,05,

g có giá trị nằm trong khoảng từ 0 đến 0,33, gồm cả 0 và 0,33,

và vật liệu này, như được tổng hợp, có ảnh nhiễu xạ tia X với ít nhất, các góc có giá trị 2θ (độ) và các cường độ tương đối được nhắc đến trước đó (bảng I) và vật liệu này trong trạng thái được nung có ảnh nhiễu xạ tia X với, ít nhất các góc có giá trị 2θ (độ) và các cường độ tương đối (I/I₀) được nhắc đến trước đó (bảng II).

Theo phương án được ưu tiên của sáng chế vật liệu tinh thể có lỗ rỗng li ti có bản chất là zeolit ITQ-55 là vật liệu silic oxit tinh khiết, mà là để nói rằng trong công thức chung được biểu thị trước đó "x", "y" và "g", chúng có giá trị 0.

Theo phương án được ưu tiên khác của sáng chế vật liệu tinh thể có lỗ rỗng li ti có bản chất là zeolit ITQ-55 là vật liệu mà có trong công thức thông thường

trước đó chỉ ra "x" bằng 0, "y" bằng 0 và "g" khác 0.

Theo phương án được ưu tiên khác của sáng chế vật liệu tinh thể có lỗ rỗng li ti có bản chất là zeolit có bản chất là ITQ-55 là vật liệu mà công thức chung của nó là:

X được chọn trong số Al, Ga, B, Fe, Cr, và tổ hợp của chúng,
y có giá trị bằng 0, và
g có giá trị bằng 0.

Phương án được ưu tiên khác của sáng chế là vật liệu tinh thể có lỗ rỗng li ti có bản chất là zeolit ITQ-55 là vật liệu mà công thức chung của nó là:

Y được chọn trong số Ti, Zr, Sn, và các tổ hợp của chúng,
x có giá trị bằng 0, và
g có giá trị bằng 0.

Theo phương án được ưu tiên khác của sáng chế vật liệu tinh thể có lỗ rỗng li ti có bản chất là zeolit ITQ-55 là vật liệu mà công thức chung của nó là:

X là Al, Ga, B, Fe, Cr, và tổ hợp của chúng,
Y là Ti, Zr, Sn, và các tổ hợp của chúng, và
g có giá trị bằng 0.

Theo phương án cụ thể của sáng chế vật liệu tinh thể có lỗ rỗng li ti có bản chất là zeolit ITQ-55 là vật liệu mà công thức chung của nó là:

X là Al, Ga, B, Fe, Cr, và tổ hợp của chúng,
y có giá trị bằng 0, và
g có giá trị khác 0 và nhỏ hơn 0,33.

Theo phương án cụ thể khác của sáng chế vật liệu tinh thể có lỗ rỗng li ti có bản chất là zeolit tự nhiên ITQ-55 là vật liệu mà công thức chung của nó là:

Y là Ti, Zr, Sn, và các tổ hợp của chúng,
x có giá trị bằng 0, và
g có giá trị khác 0 và nhỏ hơn 0,33.

Theo phương án cụ thể của sáng chế vật liệu tinh thể có lỗ rỗng li ti có bản chất là zeolit ITQ-55 là vật liệu mà công thức chung của nó là:

X là Al, Ga, B, Fe, Cr, và tổ hợp của chúng,
Y là Ti, Zr hoặc Sn, và

g có giá trị khác 0 và nhỏ hơn 0,33.

Các ảnh nhiễu xạ tia X của vật liệu ITQ-55 được thu được bằng phương pháp bột sử dụng một khe phân kỳ cố định bằng $1/8^\circ$ và sử dụng các bức xạ $K\alpha$ của Cu. Cần nhớ rằng dữ liệu nhiễu xạ được liệt kê cho mẫu zeolit ITQ-55 này như các vạch đơn hoặc duy nhất, có thể được tạo ra từ nhiều phản xạ chồng lấp, dưới các điều kiện nhất định, như các khác biệt trong các thay đổi tinh thể học, có thể xuất hiện như các vạch được phân giải hoặc được phân giải một phần. Thông thường, các sự thay đổi tinh thể học có thể bao gồm các biến đổi nhỏ trong các tham số của ô đơn vị và/hoặc các thay đổi đối xứng của các ô đơn vị mà không có sự thay đổi diễn ra trong cấu trúc. Do đó, các vị trí, các chiều rộng và các độ mở rộng tương ứng của các đỉnh phụ thuộc vào phương pháp đo nhất định trên thành phần hóa học của vật liệu, như độ hydrat hóa và kích thước tinh thể.

Cụ thể, khi ma trận chỉ gồm silic oxit và được tổng hợp với sự có mặt của các ion âm florua sử dụng ion dương diamoni hóa trị bốn $N^2, N^2, N^2, N^5, N^5, N^5, 3a, 6a$ -octametylo-octahydropentalen 2,5-diammoni như chất định hướng cấu trúc, zeolit ITQ-55 như được tổng hợp thể hiện ảnh nhiễu xạ tia X giống như ảnh được thể hiện trên Fig.1. Biểu đồ đặc trưng bởi các góc có giá trị 2θ (độ) và các cường độ tương ứng (I/I_0) được thể hiện trong bảng III, trong đó w, m, f và mf có ý nghĩa tương tự như trong bảng I.

Bảng III

2θ (độ) $\pm 0,5$	Cường độ (I/I_0)
5,78	w
7,68	w
8,91	w
9,31	mf
9,93	w
10,14	w
13,23	m
13,42	w
14,70	w

15,06	m
15,40	w
15,52	w
16,55	w
16,84	w
17,05	w
17,40	m
17,73	m
18,02	w
18,60	w
19,93	m
20,56	m
21,17	f
21,47	m
21,56	f
22,01	f
22,51	w
22,88	w
23,14	mf
24,05	w
24,42	m
24,62	w
25,28	w
25,49	w
26,61	w
26,95	m
27,95	w
28,24	w
28,59	w
28,93	w
29,21	w
29,68	w

ảnh nhiễu xạ tia X của mẫu ITQ-55 trước đó sau khi được nung tại nhiệt độ

800°C để loại bỏ các hợp chất hữu cơ được giữ trong bên trong nó được thể hiện trên Fig.2. Nhiễu xạ đồ đặc trưng bởi các góc có giá trị 2θ (độ) và các cường độ tương ứng (I/I_0) được thể hiện trong bảng IV, trong đó w, m, f và mf có ý nghĩa tương tự như trong bảng I. So sánh các nhiễu xạ đồ các tia X tương ứng với zeolit ITQ-55 được tổng hợp và trong trạng thái được nung thể hiện rằng vật liệu này ổn định nhiệt.

Bảng IV

2θ (độ) $\pm 0,5$	Cường độ (I/I_0)
6,18	w
7,80	w
7,98	w
9,82	mf
10,02	m
10,29	w
12,31	w
13,35	w
13,68	w
14,98	w
15,22	w
15,52	w
16,82	w
18,09	w
18,43	w
20,06	w
20,81	w
21,34	w
21,67	w
23,45	w
23,92	w
24,39	w

24,99	w
26,80	w
27,48	w
27,91	w
28,43	w
29,61	w

Với bất kì vật liệu tinh thể có lỗ rỗng nào, cấu trúc của ITQ-55 có thể được xác định không chỉ bởi ảnh mẫu nhiễu xạ tia X của nó mà còn bằng cấu trúc khung, tức là, các liên kết giữa các nguyên tử được phối trí tứ diện trong khung của nó. Cụ thể, ITQ-55 có khung các nguyên tử tứ diện (T) được kết nối bởi các nguyên tử cầu nối trong đó, khung nguyên tử tứ diện được xác định bằng liên kết giữa các nguyên tử tứ diện (T) gần nhất theo cách đã cho trong bảng V.

Bảng V
các liên kết nguyên tử tứ diện ITQ-55

Nguyên tử T	Được liên kết
với:	
T1	T6, T7, T55, T73
T2	T3, T5, T9, T56
T3	T2, T7, T21, T27
T4	T8, T9, T58, T73
T5	T2, T8, T52, T59
T6	T1, T8, T53, T60
T7	T1, T3, T50, T61
T8	T4, T5, T6, T51
T9	T2, T4, T21, T63
T10	T15, T16, T64, T74
T11	T12, T14, T18, T65
T12	T11, T16, T30, T36
T13	T17, T18, T67, T74
T14	T11, T17, T43, T68
T15	T10, T17, T44, T69
T16	T10, T12, T41, T70
T17	T13, T14, T15, T42
T18	T11, T13, T30, T72
T19	T24, T25, T37, T73
T20	T21, T23, T27, T38
T21	T3, T9, T20, T25
T22	T26, T27, T40, T73
T23	T20, T26, T41, T70

T24	T19, T26, T42, T71
T25	T19, T21, T43, T68
T26	T22, T23, T24, T69
T27	T3, T20, T22, T45
T28	T33, T34, T46, T74
T29	T30, T32, T36, T47
T30	T12, T18, T29, T34
T31	T35, T36, T49, T74
T32	T29, T35, T50, T61
T33	T28, T35, T51, T62
T34	T28, T30, T52, T59
T35	T31, T32, T33, T60
T36	T12, T29, T31, T54
T37	T19, T42, T43, T75
T38	T20, T39, T41, T45
T39	T38, T43, T57, T63
T40	T22, T44, T45, T75
T41	T16, T23, T38, T44
T42	T17, T24, T37, T44
T43	T14, T25, T37, T39
T44	T15, T40, T41, T42
T45	T27, T38, T40, T57
T46	T28, T51, T52, T76
T47	T29, T48, T50, T54
T48	T47, T52, T66, T72
T49	T31, T53, T54, T76
T50	T7, T32, T47, T53
T51	T8, T33, T46, T53
T52	T5, T34, T46, T48
T53	T6, T49, T50, T51
T54	T36, T47, T49, T66
T55	T1, T60, T61, T75
T56	T2, T57, T59, T63
T57	T39, T45, T56, T61
T58	T4, T62, T63, T75
T59	T5, T34, T56, T62
T60	T6, T35, T55, T62
T61	T7, T32, T55, T57
T62	T33, T58, T59, T60
T63	T9, T39, T56, T58
T64	T10, T69, T70, T76
T65	T11, T66, T68, T72
T66	T48, T54, T65, T70
T67	T13, T71, T72, T76
T68	T14, T25, T65, T71
T69	T15, T26, T64, T71

T70	T16, T23, T64, T66
T71	T24, T67, T68, T69
T72	T18, T48, T65, T67
T73	T1, T4, T19, T22
T74	T10, T13, T28, T31
T75	T37, T40, T55, T58
T76	T46, T49, T64, T67

Các nguyên tử tứ diện là các nguyên tử có khả năng có phối trí tứ diện, gồm một hoặc nhiều, nhưng không giới hạn, liti, beri, bo, magiê, nhôm, silic, photpho, titan, crôm, mangan, sắt, coban, niken, đồng, kẽm, zirconi, gali, germani, asen, indi, thiếc và antimon.

Vật liệu tinh thể có lỗ rỗng li ti tổng hợp theo sáng chế, ITQ-55, là pha tinh thể mà có hệ thống đường dẫn một chiều duy nhất bao gồm vòng 8 cạnh của các nguyên tử được phối trí tứ diện.

Ngoài ra, để mô tả cấu trúc của ITQ-55 bằng các liên kết của các nguyên tử tứ diện như trong bảng V ở trên, nó có thể được xác định bằng các ô đơn vị của nó, là đơn vị lặp lại nhỏ nhất chứa tất cả các nguyên tố cấu trúc của vật liệu. Cấu trúc lỗ của ITQ-55 được minh họa trên Fig.5 (mà chỉ thể hiện các nguyên tử tứ diện) theo hướng của các đường dẫn vòng 10 cạnh thẳng. Có một ô đơn vị đơn trên Fig.5, mà các hạn chế của nó được xác định bằng ô. Bảng VI liệt kê các vị trí thông thường của mỗi nguyên tử tứ diện trong ô đơn vị theo đơn vị Ångstrom. Mỗi nguyên tử tứ diện được gắn với nguyên tử cầu nối, mà cũng được gắn với các nguyên tử tứ diện liền kề. Các nguyên tử tứ diện là các nguyên tử có khả năng có phối trí tứ diện, gồm một hoặc nhiều, nhưng không giới hạn, liti, berili, bo, magiê, nhôm, silic, photpho, titan, crôm, mangan, sắt, coban, niken, đồng, kẽm, zirconi, gali, germanium, asen, indi, thiếc và antimon. Các nguyên tử cầu nối mà có khả năng liên kết hai nguyên tử tứ diện, ví dụ gồm, nhưng không giới hạn, oxy, nitơ, flo, lưu huỳnh, selen, và các nguyên tử carbon.

Bảng VI

Các vị trí của các nguyên tử tứ diện (T) cho cấu trúc ITQ-55.
Các giá trị, theo đơn vị Ångstrom, là xấp xỉ và đặc trưng
khi T = silic oxit và các nguyên tử cầu nối là oxy.

Các nguyên tử	x(Å)	y(Å)	z(Å)
T01	12,759	8,224	8,934
T02	14,059	11,794	0,998

T03	11,771	10,088	13,568
T04	12,623	11,812	5,674
T05	16,530	11,780	2,714
T06	15,245	8,218	7,129
T07	13,401	8,226	11,857
T08	15,507	10,720	5,364
T09	11,679	11,813	2,804
T10	1,566	1,554	8,934
T11	2,866	5,124	0,998
T12	0,577	3,418	13,568
T13	1,430	5,141	5,674
T14	5,337	5,109	2,714
T15	4,051	1,548	7,129
T16	2,208	1,556	11,857
T17	4,314	4,050	5,364
T18	0,486	5,143	2,804
T19	8,980	8,224	5,550
T20	7,680	11,794	13,487
T21	9,968	10,088	0,917
T22	9,116	11,812	8,811
T23	5,209	11,780	11,770
T24	6,495	8,218	7,355
T25	8,338	8,226	2,627
T26	6,232	10,720	9,121
T27	10,060	11,813	11,680
T28	20,173	1,554	5,550
T29	18,873	5,124	13,487
T30	21,162	3,418	0,917
T31	20,309	5,141	8,811
T32	16,403	5,109	11,770
T33	17,688	1,548	7,355
T34	19,532	1,556	2,627
T35	17,426	4,050	9,121
T36	21,253	5,143	11,680
T37	8,980	5,116	5,550
T38	7,680	1,546	13,487
T39	9,968	3,252	0,917
T40	9,116	1,529	8,811
T41	5,209	1,561	11,770
T42	6,495	5,123	7,355
T43	8,338	5,115	2,627
T44	6,232	2,620	9,121
T45	10,060	1,527	11,680
T46	20,173	11,786	5,550
T47	18,873	8,216	13,487
T48	21,162	9,923	0,917

T49	20,309	8,199	8,811
T50	16,403	8,231	11,770
T51	17,688	11,793	7,355
T52	19,532	11,785	2,627
T53	17,426	9,290	9,121
T54	21,253	8,198	11,680
T55	12,759	5,116	8,934
T56	14,059	1,546	0,998
T57	11,771	3,252	13,568
T58	12,623	1,529	5,674
T59	16,530	1,561	2,714
T60	15,245	5,123	7,129
T61	13,401	5,115	11,857
T62	15,507	2,620	5,364
T63	11,679	1,527	2,804
T64	1,566	11,786	8,934
T65	2,866	8,216	0,998
T66	0,577	9,923	13,568
T67	1,430	8,199	5,674
T68	5,337	8,231	2,714
T69	4,051	11,793	7,129
T70	2,208	11,785	11,857
T71	4,314	9,290	5,364
T72	0,486	8,198	2,804
T73	10,870	9,915	7,242
T74	22,063	3,244	7,242
T75	10,870	3,426	7,242
T76	22,063	10,096	7,242

Trong trường hợp oxy, nguyên tử cầu nối oxy cũng có thể được liên kết với nguyên tử hydro để tạo ra nhóm hydroxyl (-OH-). Trong trường hợp carbon, carbon cũng có thể liên kết với hai nguyên tử hydro để tạo ra nhóm metylen (-CH₂-). Ví dụ, các nhóm metylen liên kết cầu có mặt trong ziriconi diphosphonat, MIL-57. Xem: C. Serre, G. Férey, J. Mater. Chem. 12:1612367, 2002). Trong trường hợp nitơ, nguyên tử cầu nối nitơ là một phần của ion âm imidazolate. Ví dụ, các nhóm imidazolate cầu nối có mặt trong hợp chất loại zeolit kẽm(II) imidazolate, Zn(mim)₂·2H₂O, Zn(eim)₂·H₂O, và Zn(eim/mim)₂·1,25H₂O. Xem: X-C. Huang, Y-Y. Lin, J-P. Zhang, X-M. Chen, Angew. Chem. Int. Ed. 45:1557-1559, 2006). Các nguyên tử lưu huỳnh và seleni cầu nối có thể thấy trong họ UCR-20-23 của các vật liệu lỗ rỗng li ti. Xem: N. Zheng, X. Bu, B. Wang, P. Feng, Science 298, p. 2366 (2002). Các nguyên tử flo cầu nối có thể được thấy

trong liti hydrazine floberilate, mà có loại cấu trúc ABW. Xem: M. R. Anderson, I. D. Brown, S. Vilminot, *Acta Cryst.* 12:1612367, 1973),. Do các nguyên tử tứ diện có thể di chuyển do các lực tinh thể khác (ví dụ, sự có mặt của các loại vô cơ và hữu cơ), hoặc do sự chọn lọc của các nguyên tử tứ diện và nguyên tử cầu nối, trong khoảng $\pm 1,0$ Ångstrom được bao hàm cho x và các vị trí phối trí và khoảng $\pm 0,5$ Ångstrom cho các vị trí phối trí của y và z.

Cấu trúc hoàn thiện của ITQ-55 được dựng bằng liên kết nhiều ô đơn vị như được xác định ở trên trong khung ba chiều được liên kết đầy đủ. Các nguyên tử tứ diện trong một ô đơn vị được liên kết với các nguyên tử tứ diện nhất định trong tất cả các ô đơn vị liền kề của nó. Trong khi bảng V liệt kê các liên kết của tất cả các nguyên tử tứ diện cho ô đơn vị đã cho của ITQ-55, các liên kết có thể không phải với nguyên tử cụ thể trong cùng một ô đơn vị nhưng là với ô đơn vị liền kề. Tất cả các liên kết được liệt kê trong bảng V là sao cho chúng tới các nguyên tử tứ diện (T) gần nhất, không tính liệu chúng ở cùng một ô đơn vị hoặc trong các ô đơn vị liền kề.

Mặc dù các hệ tọa độ Đề-các đã cho trong bảng VI có thể phản xạ chính xác các vị trí của các nguyên tử tứ diện trong cấu trúc được lý tưởng hóa, cấu trúc thực sự có thể được mô tả chính xác hơn bằng khả năng liên kết giữa các nguyên tử khung như được thể hiện trong bảng V ở trên.

Một cách khác để mô tả khả năng liên kết này là bằng việc sử dụng các chuỗi tọa độ được áp dụng các khung có lỗ rỗng li ti bởi W.M. Meier và H.J. Moeck, trong tài liệu *Journal of Solid State Chemistry* 27, p. 349 (1979). Trong khung lỗ rỗng li ti, mỗi nguyên tử tứ diện, N_0 (nguyên tử T) được liên kết với $N_1 = 4$ nguyên tử T lân cận qua các nguyên tử cầu nối (thường là oxy). Các nguyên tử T lân cận sau đó thường được liên kết với các nguyên tử T N_2 trong lớp vỏ tiếp theo. Các nguyên tử N_2 trong lớp vỏ thứ hai được liên kết với các nguyên tử T trong lớp vỏ thứ ba, v.v. Mỗi nguyên tử T chỉ được đếm 1 lần, sao cho, ví dụ, nếu nguyên tử T nằm trong vòng 4 cạnh, tại lớp vỏ thứ tư nguyên tử N_0 không được đếm lần thứ hai, v.v. Sử dụng phương pháp này, chuỗi phối trí có thể được định rõ cho mỗi nguyên tử T duy nhất của mạng lưới 4 liên kết của các nguyên tử T. Dòng sau đây liệt kê số lượng cực đại của nguyên tử T trong mỗi lớp vỏ.

$$N_0 = 1 \quad N_1 \leq 4 \quad N_2 \leq 12 \quad N_3 \leq 36 \quad N_k \leq 4 \cdot 3^{k-1}$$

Bảng VII

Chuỗi phối trí cho cấu trúc ITQ-55

Nguyên tử	chuỗi phối trí
-----------	----------------

T1	4 10 20 36 54 73 100 135 181 224
T2	4 9 17 30 53 81 102 123 161 209
T3	4 10 20 34 52 76 104 133 165 203
T4	4 11 21 32 49 76 108 141 173 210
T5	4 12 22 34 46 74 108 144 174 212
T6	4 10 18 32 56 82 103 128 170 217
T7	4 10 20 34 54 81 106 134 176 222
T8	4 10 21 36 54 74 98 131 172 217
T9	4 11 19 33 57 79 103 136 172 217
T10	4 9 17 31 51 75 104 133 165 206

Một cách để xác định chuỗi phối trí cho cấu trúc đã cho là từ các phối trí nguyên tử trong các nguyên tử khung sử dụng chương trình máy tính zeoTsites (xem G. Sastre, J.D. Gale, Microporous and mesoporous Materials 43, p. 27 (2001)).

Chuỗi phối trí cho cấu trúc ITQ-55 đã cho trong bảng VII. Khả năng liên kết nguyên tử-T được liệt kê trong bảng V và chỉ dành cho các nguyên tử-T. Các nguyên tử cầu nối, như oxy thường liên kết với các nguyên tử-T. Mặc dù hầu như tất cả các nguyên tử-T được liên kết với các nguyên tử-T khác qua các nguyên tử cầu nối, được ghi nhận rằng trong một tinh thể cụ thể của một loại vật liệu có cấu trúc khung, số lượng T-nguyên tử có thể không liên kết với nhau. Lý do cho khả năng không liên kết này gồm, nhưng không bị hạn chế bởi các nguyên tử -T nằm ở các mép của các tinh thể và các vị trí khuyết tật do, ví dụ, các khoảng trống trong tinh thể. Khung được liệt kê trong bảng V và bảng VII không giới hạn theo bất kỳ cách nào bởi các thành phần của nó, các kích thước ô đơn vị hoặc đối xứng nhóm không gian.

Trong khi cấu trúc được lý tưởng hóa chỉ chứa nguyên tử-T 4 phối trí, có thể dưới các điều kiện nhất định một số nguyên tử khung có thể là 5 hoặc 6 phối trí. Điều này có thể xảy ra, ví dụ, dưới các điều kiện hydrat hóa khi thành phần của vật liệu này chứa chủ yếu photpho và các nguyên tử-T nhôm. Khi điều này

xảy ra thấy rằng các nguyên tử-T có thể cũng được phối trí với một hoặc hai nguyên tử oxy của các phân tử nước ($-\text{OH}_2$), hoặc các nhóm hydroxyl ($-\text{OH}$). Ví dụ, sàng phân tử $\text{AlPO}_4\text{-34}$ được biết đến để thay đổi đảo ngược phối trí của một số nguyên tử-T nhôm từ 4 phối trí tới 5 và 6 phối trí lúc hydrat hóa như được mô tả bởi A. Tuel và cộng sự trong tài liệu J. Phys. Chem. 104:1612367, 2000),. Cũng có thể là một số nguyên tử-T khung có thể được phối trí với nguyên tử florua ($-\text{F}$) khi các vật liệu được điều chế với sự có mặt của flo để tạo các vật liệu với các nguyên tử-T 5 phối trí như được mô tả bởi H. Koller trong J. Am. Chem Soc. 121:1613368, 1999),.

Thứ hai, sáng chế đề cập đến phương pháp để tổng hợp vật liệu tinh thể có lỗ rỗng li ti ITQ-55.

Theo sáng chế này, phương pháp để tổng hợp vật liệu tinh thể có lỗ rỗng li ti, ITQ-55, có thể gồm hỗn hợp phản ứng mà gồm ít nhất: một hoặc một vài nguồn SiO_2 , một hoặc một vài nguồn ion dương hữu cơ R, ít nhất một nguồn ion âm được chọn trong số các ion âm hidroxit, ion âm florua, và các tổ hợp của chúng và nước, nó trải qua sự gia nhiệt tại nhiệt độ giữa 80 và 200°C, và do hỗn hợp phản ứng có thành phần, về mặt các tỉ lệ mol, giữa các khoảng

$$\text{R}^+/\text{SiO}_2 = 0,01\text{-}1,0,$$

$$\text{OH}^-/\text{SiO}_2 = 0\text{-}3,0$$

$$\text{F}^-/\text{SiO}_2 = 0\text{-}3,0$$

$$(\text{F}^- + \text{OH}^-) / \text{SiO}_2 = 0,01\text{-}3,0,$$

$$\text{H}_2\text{O}/\text{SiO}_2 = 1\text{-}50.$$

Theo phương án cụ thể bổ sung của phương pháp, hỗn hợp phản ứng có thể cũng gồm một hoặc nhiều nguồn GeO_2 và do nó có thành phần, về tỉ lệ mol, được gồm giữa các khoảng

$$\text{GeO}_2 / \text{SiO}_2 = 0 \text{ và } 0,5$$

$$\text{R}^+ / (\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 0,01\text{-}1,0,$$

$$\text{F}^- / (\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 0,0\text{-}3,0,$$

$$\text{OH}^- / (\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 0,0\text{-}3,0,$$

$$(\text{F}^- + \text{OH}^-) / (\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 0,01\text{-}3,0$$

$$\text{H}_2\text{O} / (\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 1\text{-}50.$$

Theo một phương án cụ thể bổ sung của phương pháp, ion âm tốt hơn là florua và hỗn hợp phản ứng có thành phần, về tỉ lệ mol, giữa các khoảng

$$\text{GeO}_2 / \text{SiO}_2 = 0 \text{ và } 0,5$$

$$\text{R}^+ / (\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 0,01-1,0,$$

$$\text{F}^- / (\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 0,01-3,0,$$

$$\text{H}_2\text{O} / (\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 1-50.$$

Theo một phương án cụ thể bổ sung của phương pháp, ion âm tốt hơn là hydroxit và có thể có hỗn hợp phản ứng có thành phần, về tỉ lệ mol, giữa các khoảng

$$\text{GeO}_2 / \text{SiO}_2 = 0 \text{ và } 0,5$$

$$\text{R}^+ / (\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 0,01-1,0,$$

$$\text{OH}^- / (\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 0,01-3,0,$$

$$\text{H}_2\text{O} / (\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 1-50.$$

Theo một phương án cụ thể bổ sung của phương pháp, hỗn hợp phản ứng có thể cũng gồm, ít nhất, một nguồn của một hoặc nhiều nguyên tố hóa trị ba X.

Trong một phương án cụ thể, hỗn hợp phản ứng bao gồm duy nhất: một hoặc một vài nguồn SiO_2 , ít nhất một nguồn của một hoặc một vài nguyên tố hóa trị ba X, một hoặc một số nguồn ion dương hữu cơ R, ít nhất một nguồn ion âm được chọn trong các ion âm hydroxit, ion âm florua và các tổ hợp của chúng, và nước, và nó có thành phần, về tỉ lệ mol, giữa các khoảng

$$\text{R}^+ / \text{SiO}_2 = 0,01-1,0,$$

$$\text{X}_2\text{O}_3 / \text{SiO}_2 = 0-0,1, \text{ ngoại trừ giá trị } 0.$$

$$\text{OH}^- / \text{SiO}_2 = 0-3,0$$

$$\text{F}^- / \text{SiO}_2 = 0-3,0$$

$$(\text{OH}^- + \text{F}^-) / \text{SiO}_2 = 0,0-3,0, \text{ trừ giá trị } 0, \text{ và}$$

$$\text{H}_2\text{O} / \text{SiO}_2 = 1-50.$$

Theo phương án này, nếu thêm vào hỗn hợp phản ứng, ít nhất một nguồn GeO_2 , thành phần, về tỷ lệ mol sẽ giữa các khoảng

$$\text{GeO}_2 / \text{SiO}_2 = 0 \text{ và } 0,5, \text{ ngoại trừ giá trị } 0$$

$$\text{R}^+ / (\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 0,01-1,0,$$

$$\text{X}_2\text{O}_3 / (\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 0-0,1, \text{ ngoại trừ giá trị } 0,$$

$$\text{OH}^-/(\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 0-3,0$$

$$\text{F}^-/(\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 0-3,0$$

$$(\text{OH}^- + \text{F}^-)/\text{SiO}_2 = 0,0-3,0, \text{ ngoại trừ giá trị } 0, \text{ và}$$

$$\text{H}_2\text{O}/(\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 1-50.$$

Trong một phương án cụ thể, hỗn hợp phản ứng bao gồm duy nhất: một hoặc một vài nguồn SiO_2 , ít nhất một nguồn của một hoặc một vài nguyên tố hóa trị ba X, một hoặc một số nguồn ion dương hữu cơ R, một hoặc một vài nguồn ion âm được chọn trong các ion âm hydroxit, và nước, và nó có thành phần, về tỉ lệ mol, giữa các khoảng.

$$\text{R}^+/\text{SiO}_2 = 0,01-1,0,$$

$$\text{X}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2 = 0-0,1, \text{ ngoại trừ giá trị } 0,$$

$$\text{OH}^-/\text{SiO}_2 = 0-3,0, \text{ ngoại trừ giá trị } 0, \text{ và}$$

$$\text{H}_2\text{O}/\text{SiO}_2 = 1-50.$$

Theo phương án này, nếu thêm vào hỗn hợp phản ứng, ít nhất một nguồn GeO_2 , thành phần, về tỉ lệ mol sẽ ở giữa các khoảng

$$\text{GeO}_2/\text{SiO}_2 = 0 \text{ và } 0,5, \text{ ngoại trừ giá trị } 0$$

$$\text{R}^+/(\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 0,01-1,0,$$

$$\text{X}_2\text{O}_3/(\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 0-0,1, \text{ ngoại trừ giá trị } 0,$$

$$\text{OH}^-/\text{SiO}_2 = 0-3,0, \text{ ngoại trừ giá trị } 0, \text{ và}$$

$$\text{H}_2\text{O}/(\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 1-50.$$

Theo phương án cụ thể hỗn hợp phản ứng chỉ bao gồm: một hoặc một vài nguồn SiO_2 ,

ít nhất một nguồn của một hoặc một vài nguyên tố hóa trị ba X,

một hoặc một vài nguồn ion dương hữu cơ R,

một hoặc một vài nguồn ion âm florua, và

nước,

và có thành phần, về các tỉ lệ mol, giữa các khoảng

$$\text{R}^+/\text{SiO}_2 = 0,01-1,0,$$

$$\text{X}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2 = 0-0,1, \text{ ngoại trừ giá trị } 0,$$

$$\text{F}^-/\text{SiO}_2 = 0-3,0, \text{ ngoại trừ giá trị } 0, \text{ và}$$

$$\text{H}_2\text{O}/\text{SiO}_2 = 1-50.$$

Theo phương án này, nếu thêm vào hỗn hợp phản ứng, ít nhất một nguồn GeO_2 , thành phần về tỷ lệ mol sẽ ở giữa các khoảng

$$\text{GeO}_2/\text{SiO}_2 = 0 \text{ và } 0,5, \text{ ngoại trừ giá trị } 0$$

$$\text{R}^+ / (\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 0,01-1,0,$$

$$\text{X}_2\text{O}_3 / (\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 0-0,1, \text{ ngoại trừ giá trị } 0,$$

$$\text{F}^- / (\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 0-3,0, \text{ ngoại trừ giá trị } 0, \text{ và}$$

$$\text{H}_2\text{O} / (\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 1-50.$$

Theo một phương án được ưu tiên khác, trong phương pháp được mô tả ở trên, hỗn hợp phản ứng có thể cũng gồm, ít nhất một nguồn nguyên tố Y hóa trị bốn, khác Si và Ge.

Theo một phương án cụ thể, hỗn hợp phản ứng bao gồm duy nhất: một hoặc một vài nguồn SiO_2 , ít nhất một nguồn của một hoặc một vài nguyên tố hóa trị bốn Y, một hoặc một số nguồn ion dương hữu cơ R, ít nhất một nguồn ion âm được chọn trong số các ion âm hydroxit, ion âm florua và các tổ hợp của chúng, và nước, và nó có thành phần, về tỷ lệ mol, giữa các khoảng

$$\text{R}^+ / \text{SiO}_2 = 0,01-1,0,$$

$$\text{YO}_2 / \text{SiO}_2 = 0-0,1, \text{ ngoại trừ giá trị } 0,$$

$$\text{OH}^- / \text{SiO}_2 = 0-3,0,$$

$$\text{F}^- / \text{SiO}_2 = 0-3,0$$

$$(\text{OH}^- + \text{F}^-) / \text{SiO}_2 = 0-3,0, \text{ trừ giá trị } 0, \text{ và}$$

$$\text{H}_2\text{O} / \text{SiO}_2 = 1-50.$$

Theo phương án này, nếu thêm vào hỗn hợp phản ứng, ít nhất một nguồn GeO_2 , thành phần về tỷ lệ mol sẽ ở giữa các khoảng

$$\text{GeO}_2/\text{SiO}_2 = 0 \text{ và } 0,5, \text{ ngoại trừ giá trị } 0$$

$$\text{R}^+ / (\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 0,01-1,0,$$

$$\text{YO}_2/\text{SiO}_2 = 0-0,1, \text{ ngoại trừ giá trị } 0,$$

$$\text{OH}^- / (\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 0-3,0,$$

$$\text{F}^- / (\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 0-3,0$$

$$(\text{OH}^- + \text{F}^-) / (\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 0-3,0, \text{ ngoại trừ giá trị } 0, \text{ và}$$

$$\text{H}_2\text{O} / (\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 1-50.$$

Theo một phương án cụ thể khác của phương pháp, hỗn hợp phản ứng chỉ

bao gồm: một hoặc một vài nguồn SiO_2 , ít nhất nguồn của một hoặc một vài nguyên tố hóa trị bốn Y một hoặc một vài nguồn ion dương hữu cơ R, một hoặc một vài nguồn ion âm hydroxit, và nước, và nó có thành phần, về các tỉ lệ mol, giữa các khoảng

$$\text{R}^+/\text{SiO}_2 = 0,01-1,0,$$

$$\text{YO}_2/\text{SiO}_2 = 0-0,1, \text{ ngoại trừ giá trị } 0,$$

$$\text{OH}^-/\text{SiO}_2 = 0-3,0, \text{ ngoại trừ giá trị } 0, \text{ và}$$

$$\text{H}_2\text{O}/\text{SiO}_2 = 1-50.$$

Theo phương án này, nếu thêm vào hỗn hợp phản ứng, ít nhất một nguồn GeO_2 , thành phần về tỉ lệ mol sẽ ở giữa các khoảng

$$\text{GeO}_2/\text{SiO}_2 = 0 \text{ và } 0,5, \text{ ngoại trừ giá trị } 0$$

$$\text{R}^+/(\text{SiO}_2+\text{GeO}_2) = 0.01-1.0,$$

$$\text{YO}_2/\text{SiO}_2 = 0-0,1, \text{ ngoại trừ giá trị } 0,$$

$$\text{OH}^-/(\text{SiO}_2+\text{GeO}_2) = 0-3,0, \text{ ngoại trừ giá trị } 0, \text{ và}$$

$$\text{H}_2\text{O}/(\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 1-50.$$

Theo một phương án cụ thể khác của phương pháp, hỗn hợp phản ứng chỉ bao gồm: một hoặc một vài nguồn SiO_2 , ít nhất nguồn của một hoặc một vài nguyên tố hóa trị bốn Y một hoặc một vài nguồn ion dương hữu cơ R, một hoặc một vài nguồn ion âm florua, và nước, và nó có thành phần, về các tỉ lệ mol giữa các khoảng

$$\text{R}^+/\text{SiO}_2 = 0,01-1,0,$$

$$\text{YO}_2/\text{SiO}_2 = 0 -0,1, \text{ ngoại trừ giá trị } 0,$$

$$\text{OH}^-/\text{SiO}_2 = 0-3,0, \text{ ngoại trừ giá trị } 0, \text{ và}$$

$$\text{H}_2\text{O}/\text{SiO}_2 = 1-50.$$

Theo phương án này, nếu thêm vào hỗn hợp phản ứng, ít nhất một nguồn GeO_2 , thành phần về tỉ lệ mol sẽ ở giữa các khoảng

$$\text{GeO}_2/\text{SiO}_2 = 0 \text{ và } 0,5, \text{ ngoại trừ giá trị } 0$$

$$\text{R}^+/(\text{SiO}_2+\text{GeO}_2) = 0,01-1,0,$$

$$\text{YO}_2/\text{SiO}_2 = 0-0,1, \text{ ngoại trừ giá trị } 0,$$

$$\text{F}^-/(\text{SiO}_2+\text{GeO}_2) = 0-3,0, \text{ ngoại trừ giá trị } 0, \text{ và}$$

$$\text{H}_2\text{O}/(\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 1-50.$$

Theo phương án cụ thể khác của phương pháp được mô tả, hỗn hợp phản ứng có thể gồm một hoặc một vài nguồn nguyên tố hóa trị ba X cùng với một hoặc một vài nguồn của một hoặc một vài nguyên tố hóa trị bốn.

Trong một phương án cụ thể, hỗn hợp phản ứng bao gồm duy nhất: một hoặc một vài nguồn SiO_2 , ít nhất một nguồn của một hoặc một vài nguyên tố hóa trị ba X, ít nhất một nguồn của một hoặc một vài nguyên tố hóa trị bốn Y, và/hoặc một số nguồn ion dương hữu cơ R, ít nhất một nguồn ion âm được chọn lọc trong các ion âm hydroxit, ion âm florua và các tổ hợp của chúng, và nước, và hỗn hợp phản ứng có thành phần, về tỉ lệ mol, giữa các khoảng.

$$\text{R}^+/\text{SiO}_2 = 0,01-1,0,$$

$$\text{X}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2 = 0-0,1, \text{ ngoại trừ giá trị } 0,$$

$$\text{YO}_2/\text{SiO}_2 = 0-0,1, \text{ ngoại trừ giá trị } 0,$$

$$\text{OH}^-/\text{SiO}_2 = 0-3,0$$

$$\text{F}^-/\text{SiO}_2 = 0-3,0$$

$$(\text{OH}^- + \text{F}^-) / \text{SiO}_2 = 0-3,0, \text{ trừ giá trị } 0, \text{ và}$$

$$\text{H}_2\text{O}/\text{SiO}_2 = 1-50$$

Theo phương án này, nếu thêm vào hỗn hợp phản ứng, ít nhất một nguồn GeO_2 , thành phần về tỷ lệ mol sẽ ở giữa các khoảng

$$\text{GeO}_2/\text{SiO}_2 = 0 \text{ và } 0,5, \text{ ngoại trừ giá trị } 0$$

$$\text{R}^+ / (\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 0,01-1,0,$$

$$\text{X}_2\text{O}_3 / (\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 0-0,1, \text{ ngoại trừ giá trị } 0,$$

$$\text{YO}_2 / (\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 0-0,1, \text{ ngoại trừ giá trị } 0,$$

$$\text{OH}^- / (\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 0-3,0$$

$$\text{F}^- / (\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 0-3,0$$

$$(\text{OH}^- + \text{F}^-) / (\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 0-3,0, \text{ ngoại trừ giá trị } 0, \text{ và}$$

$$\text{H}_2\text{O} / (\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 1-50$$

Theo phương án cụ thể khác hỗn hợp phản ứng chỉ bao gồm: một hoặc một vài nguồn SiO_2 , ít nhất một nguồn của một hoặc một vài nguyên tố hóa trị ba X, ít nhất một nguồn của một hoặc một vài nguyên tố hóa trị bốn Y, một hoặc một vài nguồn ion dương hữu cơ R, một hoặc một vài nguồn ion âm hydroxit, và nước, và nó có thành phần, về các tỉ lệ mol giữa các khoảng

$$R^+/SiO_2 = 0,01-1,0,$$

$$X_2O_3/SiO_2 = 0-0,1, \text{ ngoại trừ giá trị } 0,$$

$$YO_2/SiO_2 = 0 \text{ và } -0,1, \text{ ngoại trừ giá trị } 0,$$

$$OH^-/SiO_2 = 0-3,0, \text{ ngoại trừ giá trị } 0, \text{ và}$$

$$H_2O/SiO_2 = 1-50.$$

Theo phương án này, nếu thêm vào hỗn hợp phản ứng, ít nhất một nguồn GeO_2 , thành phần về tỷ lệ mol sẽ được giữa các khoảng

$$GeO_2/SiO_2 = 0 \text{ và } 0,5, \text{ ngoại trừ giá trị } 0$$

$$R^+/(SiO_2+GeO_2) = 0,01-1,0,$$

$$X_2O_3/(SiO_2+GeO_2) = 0-0,1, \text{ ngoại trừ giá trị } 0,$$

$$YO_2/(SiO_2+GeO_2) = 0-0,1, \text{ ngoại trừ giá trị } 0,$$

$$OH^-/(SiO_2+GeO_2) = 0-3,0, \text{ ngoại trừ giá trị } 0, \text{ và}$$

$$H_2O/(SiO_2 + GeO_2) = 1-50.$$

Theo phương án cụ thể khác hỗn hợp phản ứng chỉ bao gồm: một hoặc một vài nguồn SiO_2 , ít nhất một nguồn của một hoặc một vài nguyên tố hóa trị ba X, ít nhất một nguồn của một hoặc một vài nguyên tố hóa trị bốn Y, một hoặc một vài nguồn ion dương hữu cơ R, một hoặc một vài nguồn ion âm fluorua, và nước, và nó có thành phần, về các tỉ lệ mol giữa các khoảng

$$R^+/SiO_2 = 0,01-1,0,$$

$$X_2O_3/SiO_2 = 0-0,1, \text{ ngoại trừ giá trị } 0,$$

$$YO_2/SiO_2 = 0 \text{ và } -0,1, \text{ ngoại trừ giá trị } 0,$$

$$F^-/SiO_2 = 0-3,0, \text{ ngoại trừ giá trị } 0, \text{ và}$$

$$H_2O/SiO_2 = 1-50$$

Theo phương án này, nếu thêm vào hỗn hợp phản ứng, ít nhất một nguồn GeO_2 , thành phần về tỷ lệ mol sẽ ở giữa các khoảng

$$GeO_2/SiO_2 = 0 \text{ và } 0,5, \text{ ngoại trừ giá trị } 0$$

$$R^+/(SiO_2+GeO_2) = 0,01-1,0,$$

$$X_2O_3/(SiO_2+GeO_2) = 0-0,1, \text{ ngoại trừ giá trị } 0,$$

$$YO_2/(SiO_2+GeO_2) = 0-0,1, \text{ ngoại trừ giá trị } 0,$$

$$F^-/(SiO_2+GeO_2) = 0-3,0, \text{ ngoại trừ giá trị } 0, \text{ và}$$

$$H_2O/(SiO_2 + GeO_2) = 1-50.$$

Theo phương pháp được mô tả trước đó, hỗn hợp phản ứng có thể cũng gồm, nguồn ion dương vô cơ M có điện tích +n, được chọn trong số H⁺, ít nhất một ion dương vô cơ có điện tích +n được chọn trong số kim loại kiềm, kiềm thổ và tổ hợp của chúng, hoặc hỗn hợp của cả hai.

Theo phương án được ưu tiên của phương pháp được mô tả, ion dương R có thể là N²,N²,N²,N⁵,N⁵,N⁵,3a,6a-octametyloctahydropentalen-2,5-diamoni. Nói chung, có thể nói rằng hỗn hợp phản ứng có thể có thành phần, về tỉ lệ mol, giữa các khoảng cách

$$\text{GeO}_2 / \text{SiO}_2 = 0 \text{ và } 0,5,$$

$$\text{R}^+ / (\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 0,01-1,0,$$

$$\text{M}^{+n} / (\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 0-1,0$$

$$\text{OH}^- / (\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 0-3,0$$

$$\text{F}^- / (\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 0-3,0$$

$$(\text{F}^- + \text{OH}^-) / (\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 0-3,$$

$$\text{X}_2\text{O}_3 / (\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 0-0,1,$$

$$\text{YO}_2 / (\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 0-0,1, \text{ và}$$

$$\text{H}_2\text{O} / (\text{SiO}_2 + \text{GeO}_2) = 1-50.$$

Theo một phương án cụ thể, thành phần của hỗn hợp phản ứng mà tạo ra để thu vật liệu ITQ-55 có thể đại diện theo cách thông thường, công thức sau đây với các giá trị của các tham số mà biểu thị tỉ lệ mol:

$$r \text{ R}_{1/p}(\text{OH}): s \text{ M}_{1/n}\text{OH}: t \text{ X}_2\text{O}_3: u \text{ YO}_2: v \text{ F}: g \text{ GeO}_2: (1-g) \text{ SiO}_2: w \text{ H}_2\text{O}$$

trong đó M là một hoặc một vài ion dương vô cơ có điện tích +n; tốt hơn là kiềm, kiềm thổ, X là một hoặc một vài nguyên tố hóa trị ba, tốt hơn là Al, B, Ga, Fe, Cr hoặc các hỗn hợp của chúng; Y là một hoặc một vài nguyên tố có hóa trị bốn khác với Si, tốt hơn là Zr, Ti, Sn, V hoặc các hỗn hợp của chúng; R là một hoặc nhiều ion dương hữu cơ, p là điện tích của ion dương hoặc điện tích trung bình của các ion dương, tốt hơn là N²,N²,N²,N⁵,N⁵,N⁵,3a,6a-octametylo - octahydropentalen-2,5-diamoni; F là một hoặc nhiều nguồn ion florua, tốt hơn là HF, NH₄F, hoặc hỗn hợp của cả hai, và các giá trị g, r, s, u, v và w biến đổi trong các khoảng thời gian.

$$g = 0-0,5, \text{ tốt hơn là } 0-0,33$$

$$r = \text{ROH}/\text{SiO}_2 = 0,01-1,0, \text{ tốt hơn là } 0,1-1,0$$

$$s = \text{M}_{1/n}\text{OH}/\text{SiO}_2 = 0-1,0, \text{ tốt hơn là } 0-0,2$$

$$t = \text{X}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2 = 0-0,1, \text{ tốt hơn là } 0-0,05$$

$$u = \text{YO}_2/\text{SiO}_2 = 0-0,1, \text{ tốt hơn là } 0-0,05$$

$$v = \text{F}/\text{SiO}_2 = 0-3,0, \text{ tốt hơn là } 0-2,0$$

$$w = \text{H}_2\text{O}/\text{SiO}_2 = 1-50, \text{ tốt hơn là } 1-20$$

Các thành phần của hỗn hợp tổng hợp có thể tới từ các nguồn khác, và dựa vào chúng, thời gian và điều kiện kết tinh có thể thay đổi.

Tốt hơn là việc xử lý nhiệt của hỗn hợp được tiến hành tại nhiệt độ giữa 110 và 200°C. Việc xử lý nhiệt của hỗn hợp phản ứng có thể được tiến hành trong điều kiện tĩnh hoặc khuấy trộn hỗn hợp. Khi sự kết tinh được hoàn thành sản phẩm rắn được phân tách bằng phương pháp lọc hoặc ly tâm và được làm khô. Việc nung sau đó tại nhiệt độ lớn hơn 350°C, tốt hơn là giữa nhiệt độ 400 và 1300°C, và tốt hơn nữa là giữa nhiệt độ 600 và 1000°C, sinh ra sự phân hủy của phần dư hữu cơ còn lại trong zeolit và đẩy chúng ra, làm sạch các đường dẫn zeolit.

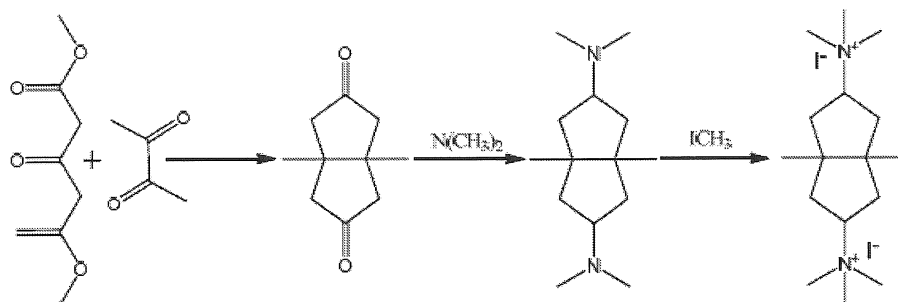
Các nguồn SiO_2 có thể là, ví dụ tetraethylorthosilicat, silic oxit keo, silic oxit vô định hình, và hỗn hợp của chúng.

Ion âm florua có thể được sử dụng như chất huy động của các loại tiền chất. Các nguồn ion florua tốt hơn là HF, NH_4F hoặc hỗn hợp cả hai.

Các ion dương hữu cơ, được biểu diễn bởi R, được bổ sung vào hỗn hợp phản ứng tốt hơn là dưới dạng hydroxit, hoặc muối khác, ví dụ, hợp chất có halogen, và hỗn hợp hydroxit và muối khác, điều này có nghĩa là, nguồn có thể được bổ sung các ion kiềm, kiềm thổ, hoặc hỗn hợp cả hai (M), dưới dạng hydroxit hoặc dưới dạng muối.

Theo cách được ưu tiên, ion dương hữu cơ R là $\text{N}^2, \text{N}^2, \text{N}^2, \text{N}^5, \text{N}^5, \text{N}^5, 3a, 6a$ -octametyl - octahydropentalen-2,5-diamoni, và nó được bổ sung tốt hơn là dưới dạng được chọn trong số hydroxit, muối khác và hỗn hợp hydroxit và muối khác, tốt hơn là hợp chất halogen.

Ion dương hữu cơ $\text{N}^2, \text{N}^2, \text{N}^2, \text{N}^5, \text{N}^5, \text{N}^5, 3a, 6a$ -octametylo-octahydropentalen-2,5-diamoni được tổng hợp theo quy trình được biểu diễn theo tóm tắt sau:



Trong quy trình này phản ứng ngưng tụ aldol được tiến hành sau phản ứng khử carboxyl giữa dimetyl 1,3-acetonadicarboxylat với 2,3 - butanodione để tạo ra dioxeton tương ứng, 3a,6a-dimetyltetrahydropentalen - 2,5(1H,3H)-dione. Dioxeton được biến đổi thành diamin tương ứng bằng phản ứng khử amin với sự có mặt của dimethylamin và sử dụng natri xyanoborohiđrua như chất khử, tạo ra diamin, $\text{N}_2, \text{N}_2, \text{N}^5, \text{N}^5, 3a, 6a$ - hexamethyloctahydropentalen-2,5-diamine. Diamin này được tạo bậc bốn với metyl iotđua để tạo ra muối $\text{N}^2, \text{N}^2, \text{N}^2, \text{N}^5, \text{N}^5, \text{N}^5, 3a, 6a$ - octametyloctahydropentalen-2,5-diamoni di-iotđuae.

Muối dialkylamonidiotđua có thể được hòa tan trong nước và được trao đổi với dạng hydroxit của nó sử dụng nhựa trao đổi ion âm dưới dạng hydroxit.

Theo một phương án cụ thể của phương pháp, khối lượng được bổ sung vào hỗn hợp phản ứng của vật liệu tinh thể có lỗ rỗng li ti, ITQ-555, từ sáng chế này như chất hoạt hóa của sự kết tinh theo khối lượng giữa 0,01 và 20% trọng lượng, tốt hơn là giữa 0,05 và 10% trọng lượng đối với tổng oxit vô cơ được bổ sung.

Ngoài ra, vật liệu được sản xuất theo phương pháp theo sáng chế có thể được tạo hạt với các kỹ thuật đã biết.

Sáng chế cũng đề cập đến việc sử dụng vật liệu tinh thể có lỗ rỗng li ti được mô tả trước đó và thu được theo quy trình được mô tả trước đó.

Vật liệu theo sáng chế, có thể được sử dụng như chất xúc tác hoặc thành phần của các chất xúc tác trong quy trình biến đổi các hợp chất hữu cơ, hoặc như chất hấp phụ trong quá trình hấp phụ và phân tách các thành phần hữu cơ.

Đối với việc sử dụng vật liệu theo sáng chế trong quy trình được đề cập trước đó tốt hơn là ITQ-55 ở dạng được nung mà không có vật chất hữu cơ bên trong nó.

Vật liệu ITQ-55 được sử dụng trong các ứng dụng xúc tác có thể dưới dạng

axit của nó và/hoặc được trao đổi với ion dương phù hợp, như H^+ và/hoặc ion dương vô cơ có điện tích $+n$, được chọn trong số nhóm các kim loại kiềm, kiềm thổ, lantan và các tổ hợp của chúng.

Vật liệu ITQ-55 được sử dụng trong các quy trình hấp phụ/phân tách có thể ở dạng silic nguyên chất, có nghĩa là, ko chứa các nguyên tố khác silic và oxy trong thành phần của nó.

Vật liệu ITQ-55 được sử dụng trong các quy trình hấp phụ/phân tách có thể ở dạng silic nguyên chất, có nghĩa là, ko chứa các nguyên tố khác silic và oxy trong thành phần của nó.

Vật liệu ITQ-55 đặc biệt phù hợp cho việc sử dụng như chất hấp phụ chọn lọc CO_2 trong sự có mặt của hydrocarbon, tốt hơn là metan, etan, etylen và các tổ hợp của chúng, trong các dòng mà chứa các khí này, cùng với chất hấp phụ ở dạng được bột nghiền và hạt hoặc dưới dạng màng.

Theo một phương án cụ thể, vật liệu ITQ-55 có thể được sử dụng để phân tách CO_2 và metan.

Theo một phương án cụ thể, vật liệu ITQ-55 có thể được sử dụng để phân tách CO_2 và etan.

Theo một phương án cụ thể, vật liệu ITQ-55 có thể được sử dụng để phân tách CO_2 và etylen.

Theo một phương án cụ thể khác, vật liệu ITQ-55 đặc biệt phù hợp với việc phân tách trong các quy trình hấp phụ của hydrocarbon của 1 hoặc 2 nguyên tử carbon mà chứa các khí này, cùng với chất hấp phụ được nghiền bột hoặc tạo hạt hoặc dưới dạng màng.

Theo một phương án cụ thể, vật liệu ITQ-55 được sử dụng như chất hấp phụ chọn lọc của etylen trong sự có mặt của etan.

Theo một phương án cụ thể, vật liệu ITQ-55 được sử dụng như chất hấp phụ chọn lọc của etylen trong sự có mặt của metan.

Qua phần mô tả và yêu cầu bảo hộ từ "gồm" và các biến thể của nó không nhằm loại trừ các đặc điểm kỹ thuật, chất phụ gia, các thành phần hoặc các bước. Đối với người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực này, các đối tượng khác, các lợi ích và các dấu hiệu của sáng chế có thể đến từ một phần của phần mô tả và

một phần từ thực tiễn của sáng chế.

Khái quát quy trình phân tách và phương pháp sử dụng

Trong phần thảo luận này, chất lưu được xác định là khí hoặc chất lỏng, gồm hỗn hợp của cả chất khí và chất lỏng. Trong phần thảo luận này, nhiệt độ môi trường xung quanh thường đề cập đến là áp suất khoảng 1 atm (khoảng 101 kPa) và nhiệt độ khoảng 20°C.

Trong các khía cạnh khác, các quy trình được đề xuất mà thực hiện sàng phân tử tương ứng với zeolit ITQ-55 như được mô tả ở đây cho việc hấp phụ và/hoặc phân tách các thành phần của các dòng chất lưu, như các dòng khí, các dòng chất lỏng, các dòng tương ứng với hỗn hợp khí và chất lỏng. Zeolit ITQ-55 có thể phù hợp để phân tách nhiều phân tử nhỏ và/hoặc các khí trơ. Ở một số nhiệt độ, sàng phân tử tương ứng với zeolit ITQ-55 có thể phù hợp với việc hấp phụ nhiều phân tử nhỏ trong khi giảm, tối thiểu hóa, và thậm chí loại bỏ một cách cơ bản việc hấp phụ metan và các hợp chất chứa ít nhất một nhóm metyl. Ví dụ, zeolit ITQ-55 có thể phù hợp cho việc thực hiện các việc phân tách để phân tách H₂, N₂, hoặc CO₂ ra khỏi metan. Nhiều loại phân tách chất lưu khác có thể cũng được thực hiện phụ thuộc vào thành phần của khí đầu vào và nhiệt độ và áp suất trong suốt quy trình phân tách.

Cấu trúc lỗ của zeolit ITQ-55 gồm các đường dẫn vòng 8 cạnh. Các đường dẫn vòng 8 cạnh gồm kích thước đường dẫn dạng lỗ nhỏ nhất trong mạng lưới lỗ là 5,9 Ångstrom x 2,1 Ångstrom ở nhiệt độ môi trường xung quanh. Kích thước đường dẫn dạng lỗ nhỏ nhất có thể hạn chế các loại hợp chất mà có thể đi vào và/hoặc đi qua mạng lưới lỗ một cách hiệu quả. Tuy nhiên, vòng 8 cạnh mà cung cấp kích thước nhỏ nhất cũng được cho là có tính linh hoạt. Tính linh hoạt này có thể cho phép vòng 8 cạnh biến dạng chẳng hạn như do sự dao động nhiệt và/hoặc do sự dao động xảy ra tại các áp suất tăng, mà có thể dẫn đến thay đổi tạm thời tiềm năng trong kích thước đường dẫn dạng lỗ. Không bị ràng buộc bởi bất kỳ lý thuyết cụ thể nào, người ta tin rằng độ linh hoạt của vòng 8 cạnh xác định kích thước đường dẫn dạng lỗ có thể cho phép điều chỉnh bổ sung việc phân tách nhiều hợp chất khác nhau dựa trên nhiệt độ và/hoặc áp suất.

Theo cách bổ sung hoặc thay thế, kích thước hạt phân tử của các tinh thể

ITQ-55 được sử dụng trong cấu trúc chất hấp phụ hoặc cấu trúc màng có thể có ảnh hưởng đến khả năng của cấu trúc chất hấp phụ hoặc cấu trúc màng để thực hiện việc phân tách. Như một ví dụ, kích thước hạt của các tinh thể ITQ-55 có ảnh hưởng lên lượng "không gian chết" mà xuất hiện tại bề mặt và/hoặc trong phần bên trong của cấu trúc chất hấp phụ hoặc cấu trúc màng. Một cách chính xác, mật độ ép chặt của tập hợp quả cầu rắn của kích thước tương tự phụ thuộc vào bán kính của hình cầu. Đối với tập hợp các hình cầu rắn, bán kính trung bình càng lớn, kích thước khoảng cách hoặc khoảng trống giữa các quả cầu rắn càng lớn. Không bị giới hạn bởi lý thuyết cụ thể nào, người ta tin rằng đối với tập hợp các tinh thể ITQ-55 ở cùng kích thước, kích thước của chỗ trống hoặc khoảng chết được tạo ra sau khi ép chặt các tinh thể có thể liên quan đến kích thước hạt phân tử trung bình. Việc có kích thước hạt phân tử nhỏ hơn có thể giảm khoảng chết, do đó cung cấp diện tích bề mặt lỗ được tăng để nhận các thành phần chất lưu để phân tách.

Theo cách bổ sung hoặc thay thế, thành phần của các tinh thể ITQ-55 được sử dụng trong cấu trúc chất hấp phụ hoặc cấu trúc màng có thể có ảnh hưởng đến khả năng của cấu trúc chất hấp phụ hoặc cấu trúc màng để thực hiện việc phân tách. Trong một số khía cạnh, ITQ-55 có thể được tổng hợp để có cấu trúc khung được tạo nên cơ bản bằng silic và oxy. Trong các khía cạnh khác, phần khung các nguyên tử trong cấu trúc ITQ-55 có thể được thay thế bằng các nguyên tố khác. Ví dụ, phần silic trong cấu trúc khung có thể được thay thế bằng các nguyên tử từ nhóm khác nhau trong bảng tuần hoàn, như Al, P hoặc B. Như một ví dụ khác, phần silicon trong khung có thể được thay thế bằng các nguyên tử từ hàng khác nhau của bảng tuần hoàn, như Ge hoặc P. Các biến thể thành phần có thể thay đổi kích thước trong cấu trúc tinh thể và/hoặc thay đổi ái lực của ITQ-55 đối với một hoặc nhiều thành phần tiềm năng để hấp phụ. Các thay đổi của kích thước lỗ và/hoặc ái lực có thể có khả năng cải thiện độ chọn lọc (như độ chọn lọc theo động học) cho một hoặc nhiều loại phân tách.

Zeolit ITQ-55 có thể được sử dụng để phân tách các thành phần trong dòng chất lưu (ví dụ, dòng khí) theo các cách khác nhau. Theo một số khía cạnh, zeolit ITQ-55 có thể được sử dụng để tạo thành cấu trúc màng, sao cho việc phân tách

các thành phần chất lưu được thực hiện bằng việc tạo thành các phần thấm qua và phần giữ lại của chất lưu trên mặt tương ứng của màng. Zeolit ITQ-55 có thể hỗ trợ với việc phân tách bằng màng, ví dụ, bằng việc có các độ chọn lọc thay đổi để cho phép các thành phần chất lưu đi qua màng.

Trong các khía cạnh khác, zeolit ITQ-55 có thể được sử dụng để tạo thành cấu trúc chất hấp phụ với bình phân tách, sao cho việc phân tách các thành phần chất lưu có thể được thực hiện bằng việc hấp phụ phần dòng chất lưu trong cấu trúc chất hấp phụ trong khi cho phép phần dòng chất lưu còn lại thoát khỏi bình phân tách. Cấu trúc hấp phụ có thể bao gồm zeolit ITQ-55, hoặc zeolit ITQ-55 có thể tạo ra lớp phủ cho cấu trúc hấp phụ, sao cho các phân tử có thể đi qua các lỗ của các tinh thể ITQ-55 để đi vào cấu trúc ưu tiên. Zeolit ITQ-55 có thể hỗ trợ với việc thực hiện phân tách sử dụng cấu trúc hấp phụ này, ví dụ, bằng việc có các độ chọn lọc tính chọn lọc thay đổi để cho phép các thành phần chất lưu đi vào cấu trúc hấp phụ.

Trong các khía cạnh khác, ITQ-55 có thể được sử dụng như phần của cấu trúc lưu trữ cho chất lưu, như cấu trúc lưu trữ trong bình chứa. Cấu trúc lưu trữ trong một số khía cạnh có thể tương tự với cấu trúc hấp phụ. Tuy nhiên, cấu trúc lưu trữ có thể được sử dụng theo cách khác, để các khí (hoặc thông thường hơn là các chất lưu) mà đi vào cấu trúc lưu trữ có thể được giữ lại một khoảng thời gian được kéo dài. Cấu trúc lưu trữ có thể bao gồm zeolit ITQ-55, hoặc zeolit ITQ-55 có thể tạo ra lớp phủ cho cấu trúc lưu trữ, sao cho các phân tử có thể đi qua các lỗ của các tinh thể ITQ-55 để đi vào cấu trúc lưu trữ. Zeolit ITQ-55 có thể hỗ trợ lưu trữ các thành phần chất lưu sử dụng cấu trúc lưu trữ, ví dụ, bằng việc có các độ chọn lọc thay đổi để cho phép các thành phần chất lưu đi vào cấu trúc lưu trữ. Zeolit ITQ-55 có thể có khả năng hỗ trợ lưu trữ các chất lưu sử dụng cấu trúc lưu trữ, ví dụ, bằng việc có tốc độ di chuyển qua mạng lưới lỗ mà lớn hơn tại nhiệt độ cao hơn và thấp hơn tại nhiệt độ được giảm. Sự chênh lệch tốc độ di chuyển hoặc chuyển động bên trong các lỗ của ITQ-55 có thể được cải thiện bằng tính chất linh hoạt của vòng 8 cạnh mà xác định kích thước lỗ nhỏ nhất cho ITQ-55.

Phân tách các thành phần chất lưu

Khi dòng chất lưu được tiếp xúc với cấu trúc màng, cấu trúc hấp phụ, cấu trúc lưu trữ, hoặc cấu trúc lỗ rỗng khác mà chứa zeolit ITQ-55 như một phần bề mặt của cấu trúc, việc phân tách có chọn lọc các thành phần trong dòng chất lưu có thể xảy ra nếu một hoặc nhiều thành phần trong dòng chất lưu có đường kính động học đủ nhỏ.

Một số quá trình phân tách chất lưu có thể được thực hiện dựa trên một thành phần của chất lưu có đường kính động học đủ nhỏ để đi vào các lỗ của zeolit ITQ-55 trong khi thành phần thứ hai là quá lớn để đi vào mạng lưới lỗ dưới các điều kiện tiếp xúc. Ví dụ, đã xác định được rằng các hydrocarbon có nhóm methyl cuối (gồm metan) và/hoặc các hydrocarbon khác chứa ba hoặc nhiều hơn ba nguyên tử carbon thông thường có các đường kính động học mà quá lớn để đi vào và/hoặc đi qua mạng lưới lỗ của ITQ-55 tại các điều kiện môi trường xung quanh thông thường, chẳng hạn nhiệt độ 20°C và áp suất 0,1 MPa. Điều này trái ngược với các hợp chất có đường kính động học nhỏ hơn, chẳng hạn như H_2 hoặc N_2 , mà có thể đi vào và/hoặc đi qua mạng lưới lỗ. Trong dạng trạng thái này, việc phân tách có thể được thực hiện với mức độ chọn lọc cao, như lượng hydrocarbon đi vào lớp ITQ-55 có thể về cơ bản bị giới hạn với các hydrocarbon mà đi vào phần không liên tục trong lớp ITQ-55, chẳng hạn như các lỗ trung bình hoặc lỗ lớn tại tinh thể hoặc đường biên của hạt.

Các dạng phân tách khác có thể phụ thuộc vào những khác biệt trong hấp thu bởi zeolit ITQ-55 giữa hai (hoặc nhiều hơn) các thành phần chất lưu mà có các đường kính động học đủ nhỏ để đi vào và/hoặc đi qua mạng lưới lỗ của ITQ-55. Trong trạng thái này, việc phân tách các thành phần trong dòng chất lưu đầu vào có thể được thực hiện dựa trên việc phân tách theo động học hoặc phân tách theo sự cân bằng của các thành phần. Bản chất của việc phân tách có thể phụ thuộc vào, ví dụ, các đường kính động học tương đối của các thành phần và/hoặc ái lực tương đối của các thành phần với ITQ-55.

Một ví dụ về quy trình mà mối quan hệ giữa các đường kính động học và/hoặc ái lực của các phân tử và kích thước của mạng lưới lỗ của zeolit có thể thích hợp là trong hấp phụ có chọn lọc các thành phần từ dòng chất lưu. Trong các quy trình hấp phụ được điều khiển theo cân bằng, phần lớn độ chọn lọc được đảm nhiệm bởi các tính chất hấp phụ cân bằng của chất hấp phụ, và đường đẳng nhiệt hấp phụ có tính cạnh tranh của thành phần chất lưu thứ nhất trong các lỗ rỗng li ti hoặc thể tích rỗng của

chất hấp phụ không được ưu tiên so với thành phần thứ hai. Trong các quy trình được điều khiển theo động học, phần lớn độ chọn lọc được đảm nhiệm bởi các tính chất khuếch tán của chất hấp phụ và hệ số khuếch tán vận chuyển trong các lỗ rỗng li ti và thể tích rỗng của các thành phần được hấp phụ cạnh tranh. Trong một số quy trình được điều khiển theo động học, thành phần với độ khuếch tán cao hơn có thể được hấp phụ ưu tiên so với thành phần với độ khuếch tán thấp hơn. Ngoài ra hoặc thay thế, ái lực tương đối của các thành phần được hấp phụ cạnh tranh với ITQ-55 có thể là một yếu tố, mà sau đó có thể là độ chọn lọc trong phân tách các thành phần so với độ chọn lọc mong muốn chỉ dựa trên độ khuếch tán. Ngoài ra, trong các quy trình được điều khiển theo động học với các chất hấp phụ có lỗ rỗng li ti, độ chọn lọc khuếch tán có thể phát sinh do sự chênh lệch khuếch tán trong các lỗ rỗng li ti của chất hấp phụ và/hoặc do trở lực bề mặt khuếch tán có chọn lọc trong các tinh thể hoặc các hạt mà tạo nên chất hấp phụ.

Trừ khi được chỉ ra theo cách khác, thuật ngữ "độ chọn lọc chất hấp phụ" như được sử dụng ở đây dựa trên sự so sánh hai thành phần (theo cặp) về nồng độ mol của các thành phần trong dòng cấp và tổng số mol của mỗi thành phần trong số các thành phần này mà được hấp phụ bằng chất hấp phụ đặc biệt trong suốt bước hấp phụ của chu trình quy trình (chẳng hạn như chu trình quy trình hấp phụ dao động) dưới các điều kiện vận hành hệ thống và thành phần dòng cấp cụ thể. Đối với nguyên liệu cấp chứa thành phần A, thành phần B, cũng như các thành phần bổ sung, chất hấp phụ mà có "độ chọn lọc" đối với thành phần A lớn hơn thành phần B sẽ ở cuối bước hấp phụ của chu trình quy trình tỉ số: $U_A = (\text{tổng số mol của A trong chất hấp phụ})/(\text{nồng độ mol của A trong nguyên liệu cấp})$ mà lớn hơn tỉ số $U_B = (\text{tổng số mol của B trong chất hấp phụ})/(\text{nồng độ mol của B trong nguyên liệu cấp})$, trong đó U_A là "độ hấp phụ của thành phần A" và U_B là "độ hấp phụ của thành phần B". Do đó với chất hấp phụ có độ chọn lọc với thành phần A trên thành phần B là lớn hơn một: $\text{độ chọn lọc} = U_A/U_B$ (trong đó $U_A > U_B$). Giữa việc so sánh các thành phần khác nhau trong nguyên liệu cấp, thành phần với tỉ số nhỏ nhất về tổng số mol được chọn ra trong chất hấp phụ trên nồng độ mol của nó trong nguyên liệu cấp có thể được đề cập đến như thành phần "nhẹ nhất" trong quy trình hấp phụ dao động, trong khi thành phần với tỉ số lớn nhất về tổng số mol được chọn ra trong chất hấp phụ trên nồng độ mol của nó trong nguyên

liệu cấp có thể được đề cập đến như thành phần "nặng nhất". Điều này nghĩa là trong suốt bước hấp phụ theo nồng độ mol của thành phần nhẹ nhất trong dòng đi ra lớn hơn nồng độ mol của thành phần nhẹ nhất trong nguyên liệu cấp.

Trong một số khía cạnh, độ chọn lọc của chất hấp phụ có thể được đặc trưng theo cách bổ sung hoặc thay thế dựa trên "độ chọn lọc theo động học" cho hai hoặc nhiều hơn hai thành phần chất lưu. Như đã được sử dụng ở đây, thuật ngữ "độ chọn lọc theo động học" được định nghĩa là tỉ số của các hệ số khuếch tán thành phần đơn lẻ, D (tính bằng $\text{m}^2/\text{giây}$), cho hai loại khác nhau. Các hệ số khuếch tán thành phần đơn lẻ này cũng được biết đến là các hệ số khuếch tán vận chuyển mà được đo với chất hấp phụ đã cho với thành phần khí tinh khiết đã cho. Do đó, ví dụ, độ chọn lọc theo động học của một chất hấp phụ cụ thể cho thành phần A với thành phần B sẽ bằng D_A/D_B . Các hệ số khuếch tán thành phần đơn lẻ cho vật liệu có thể được xác định bằng các thử nghiệm đã được biết đến trong nghiên cứu các vật liệu hấp phụ. Các cách ưu tiên để đo hệ số khuếch tán theo động học là với kỹ thuật đáp ứng tần số được mô tả bởi Reyes và cộng sự trong tài liệu "Frequency Modulation Methods for Diffusion and Adsorption Measurements in Porous Solids", J. Phys. Chem. B. 101, trang 614-622, 1997.

Trong các khía cạnh khác, độ chọn lọc của chất hấp phụ có thể được đặc trưng theo cách bổ sung hoặc thay thế dựa trên "độ chọn lọc cân bằng" cho hai hoặc nhiều hơn hai thành phần chất lưu. Như được sử dụng ở đây, thuật ngữ "độ chọn lọc cân bằng" được định nghĩa trong thuật ngữ về độ dốc của thành phần đơn lẻ hấp thu vào trong chất hấp phụ (tính bằng $\mu\text{mol/g}$) đối với áp suất (tính bằng torr) trong phần tuyến tính, hoặc "chế độ Henry", của đường đẳng nhiệt hấp thu với chất hấp phụ đã cho với thành phần tinh khiết đã cho. Độ dốc của đường này được gọi ở đây là hằng số Henry hoặc "độ dốc hấp thu cân bằng", hoặc "H". "Độ chọn lọc cân bằng" được định nghĩa trong thuật ngữ về sự so sánh hai thành phần (hoặc theo cặp) của các hằng số Henry của các thành phần khác nhau trong nguyên liệu cấp cho chất hấp phụ cụ thể. Do đó, ví dụ, độ chọn lọc cân bằng cho chất hấp phụ cụ thể cho thành phần A đối với thành phần B sẽ là H_A/H_B .

Ví dụ khác về quy trình mà mối quan hệ giữa các đường kính động học của các phân tử (hoặc nguyên tử), các ái lực của các phân tử (hoặc nguyên tử) với ITQ-55, và

kích thước của mạng lưới lỗ của zeolit có thể thích hợp là trong phân tách có chọn lọc các thành phần từ dòng chất lưu sử dụng màng. Những việc phân tách bằng màng có thể được thực hiện trước tiên dựa trên độ chọn lọc theo động học của màng. Không giống như chất hấp phụ, các thành phần chất lưu bất kỳ đi qua màng để tạo thành phần thấm qua có thể được dời đi theo chu kỳ hoặc liên tục. Ví dụ, mặt thấm qua của màng có thể được tiếp xúc với dòng quét qua. Điều này có thể ngăn nồng độ đáng kể của thành phần khỏi việc tích tụ trên mặt thấm qua của màng, để việc vận chuyển thành phần chất lưu quan tâm từ mặt giữ lại đến mặt thấm qua được tăng cường hoặc tối đa hóa.

Trừ khi được chỉ ra theo cách khác, thuật ngữ "độ chọn lọc của màng" như được sử dụng ở đây dựa trên sự so sánh hai thành phần (theo cặp) về nồng độ mol của các thành phần trong dòng cấp và tổng số mol của các thành phần này mà được đi qua màng để hình thành phần thấm qua trong suốt quá trình phân tách bằng màng dưới các điều kiện vận hành hệ thống cụ thể và thành phần dòng cấp. Đối với nguyên liệu cấp chứa thành phần A, thành phần B, cũng như các thành phần bổ sung, màng mà có "độ chọn lọc" đối với thành phần A lớn hơn so với thành phần B sẽ có được tại các thời điểm khác nhau trong suốt quá trình phân tách bằng màng và/hoặc tại cuối của quá trình phân tách bằng màng, tỉ số: $X_A = (\text{nồng độ mol của A trong phần thấm qua})/(\text{nồng độ mol của A trong nguyên liệu cấp})$ mà lớn hơn tỉ số: $X_B = (\text{nồng độ mol của B trong phần thấm qua})/(\text{nồng độ mol của B trong nguyên liệu cấp})$. Do đó, với màng có độ chọn lọc với thành phần A trên thành phần B mà lớn hơn một, độ chọn lọc có thể được xác định là độ chọn lọc $= X_A/X_B$ (trong đó $X_A > X_B$).

Vẫn là ví dụ khác về quy trình mà mối quan hệ giữa các đường kính động học của các phân tử (hoặc nguyên tử), các ái lực của các phân tử (hoặc nguyên tử) với ITQ-55, và kích thước của mạng lưới lỗ của zeolit có thể là thích hợp trong lưu trữ thành phần chất lưu. Trong trạng thái lưu trữ, nếu thành phần chất lưu để lưu trữ được tiếp xúc với cấu trúc lưu trữ (chất hấp phụ) như phần của dòng về cơ bản tinh khiết của thành phần chất lưu, đường kính động học của thành phần và/hoặc ái lực tương đối của thành phần với ITQ-55 có thể ít quan trọng miễn là thành phần có thể đi vào mạng lưới lỗ. Tuy nhiên, nếu thành phần chất lưu để lưu trữ được đưa vào như một phần của dòng nhiều thành phần, khả năng để tải cấu trúc lưu trữ có thể phụ thuộc vào độ chọn

lọc của cấu trúc lưu trữ (hoặc theo động học hoặc cân bằng) cho thành phần mong muốn. Ngoài ra, trong suốt giai đoạn lưu trữ khả năng thay đổi các điều kiện lưu trữ cho cấu trúc lưu trữ có thể là có lợi trong việc giữ lại thành phần chất lưu trong cấu trúc lưu trữ, chẳng hạn như bằng cách giảm hoặc tối thiểu hóa khả năng thành phần để đi ra khỏi cấu trúc lưu trữ trong suốt giai đoạn lưu trữ.

Dựa trên kích thước vòng 8 cạnh trong mạng lưới lỗ của zeolit ITQ-55, các thành phần chất lưu mà có thể được hấp phụ và/hoặc phân tách sử dụng zeolit tại các điều kiện môi trường xung quanh (tức là, nhiệt độ 20°C và áp suất 0,1MPa) có thể tương ứng với các thành phần với đường kính động học tương đối nhỏ, chẳng hạn như đường kính động học nhỏ hơn hoặc bằng khoảng 0,40nm hoặc nhỏ hơn hoặc bằng khoảng 0,38nm. Danh sách các phân tử (và các nguyên tử khí trơ) dưới đây cung cấp danh sách về các thành phần mà có thể được hấp phụ và/hoặc phân tách sử dụng zeolit ITQ-55. Danh sách dưới đây không có mục đích liệt kê hoàn toàn. Danh sách được dựa trên một cách xấp xỉ các trị số được xác định trước về đường kính động học cho các thành phần được liệt kê. Nên lưu ý rằng nhiều trị số được xác định trước này được dựa vào dữ kiện của phân tử hình cầu. Kết quả là, thứ tự được thể hiện trong danh sách dưới đây có thể không nhất thiết tương ứng với độ chọn lọc theo động học thực tế. Ví dụ, các trị số theo lý thuyết về đường kính động học của H₂O và H₂ là giống nhau, với H₂O đôi khi có đường kính động học nhỏ hơn là được thể hiện trong danh sách. Tuy nhiên, trong thực tế H₂ có thể được ưu tiên theo động học cho việc hấp phụ dưới một số điều kiện hấp phụ và/hoặc phân tách.

Các phân tử và nguyên tử sau đây nói chung là dưới metan trong đường kính động học: He, H₂O, H₂, Ne, N₂O, NO, HCl, Cl₂, CO₂, C₂H₂, Ar, NO₂, O₂, Br₂, HBr, NH₃, H₂S, SO₂, CS₂, Kr, N₂, CO. Ngoài danh sách này, cần lưu ý rằng etylen và formaldehyt, mà có các đường kính động học biểu kiến (theo giả thiết về phân tử hình cầu) lớn hơn so với metan, cũng có thể được hấp phụ và/hoặc phân tách bằng zeolit ITQ-55. Cần lưu ý rằng etylen và formaldehyt là các nguyên tử phẳng hiệu quả, và do đó giả thiết về nguyên tử hình cầu là ít thích hợp. Tương tự, các phân tử như axetylen được đại diện ít bởi giả thiết phân tử hình cầu. Không bị ràng buộc bởi bất kỳ lý thuyết cụ thể nào, người ta tin rằng đường kính động học của metan là tương tự bằng 0,38nm hoặc 0,40nm dọc theo trục bất kỳ của metan, do hình dạng gần như hình cầu của phân

tử metan (dựa trên đối xứng tứ diện). Ngược lại, đường kính động học của các phân tử chẳng hạn như axetylen, etylen, và formaldehyt được tin rằng thay đổi phụ thuộc vào định hướng của phân tử. Do đó, mặc dù đường kính động học biểu kiến của etylen và formaldehyt (dưới giả thiết phân tử hình cầu) có thể là lớn hơn metan, phân tử etylen hoặc formaldehyt được định hướng thực sự có thể thể hiện mặt cắt ngang động học nhỏ hơn, mà cho phép các phân tử này đi vào mạng lưới lỗ ITQ-55.

Trong một số khía cạnh, có thể có mong muốn để sử dụng zeolit ITQ-55 cho quá trình hấp phụ và/hoặc phân tách các thành phần mà zeolit ITQ-55 có thể cung cấp đủ độ chọn lọc giữa các thành phần. Ví dụ, việc sử dụng ITQ-55 có thể cung cấp độ chọn lọc cho thành phần chất lưu thứ nhất trên thành phần chất lưu thứ hai, hoặc cho quá trình hấp phụ hoặc cho quá trình phân tách thông qua màng, ít nhất khoảng 5 hoặc ít nhất khoảng 10 hoặc ít nhất khoảng 20 hoặc ít nhất khoảng 30.

Các ví dụ về quá trình phân tách mà có thể được thực hiện (hoặc thông qua hấp phụ hoặc phân tách bằng màng) bao gồm, nhưng không giới hạn:

a) phân tách CO₂ và/hoặc CO khỏi các hydrocarbon, rượu, và/hoặc các hợp chất hữu cơ khác có ba hoặc nhiều hơn ba nguyên tử (không chứa hydro) nặng, chẳng hạn như CO₂ và/hoặc CO khỏi metan, etan, etylen, axetylen, khí tự nhiên, khí thải, khí tự nhiên dạng lỏng, hoặc tổ hợp của chúng. Do quá trình hấp phụ thấp hoặc giảm thiểu các hydrocarbon bằng ITQ-55, quá trình phân tách có thể được thực hiện dưới các điều kiện thích hợp bất kỳ, miễn là nhiệt độ đủ thấp để về cơ bản tối thiểu hóa sự hấp phụ của các hydrocarbon.

b) phân tách CO₂ và/hoặc CO khỏi nitơ. Tùy ý, việc phân tách này có thể được thực hiện tại nhiệt độ dưới (hoặc về cơ bản là dưới) 0°C và tại áp suất thấp áp suất vừa phải để cải thiện hơn độ chọn lọc của quá trình phân tách dưới hoặc các điều kiện phân tách theo động học hoặc các điều kiện phân tách cân bằng.

c) phân tách etylen, formaldehyt và/hoặc axetylen khỏi các hợp chất hữu cơ có ba hoặc nhiều hơn ba nguyên tử (không chứa hydro) nặng. Do quá trình hấp phụ thấp hoặc giảm thiểu các hydrocarbon và/hoặc các hợp chất hữu cơ lớn bằng ITQ-55, quá trình phân tách này có thể được thực hiện dưới các điều kiện thích hợp bất kỳ, miễn là nhiệt độ đủ thấp để về cơ bản tối thiểu hóa sự hấp phụ của các hydrocarbon và/hoặc các hợp chất hữu cơ lớn.

d) phân tách axetylen khỏi etylen, metan, và/hoặc etan.

e) phân tách NO_2 và/hoặc SO_2 khỏi khí thải. Khí thải có thể chứa các hydrocarbon khác nhau. Do quá trình hấp phụ các hydrocarbon thấp hoặc giảm thiểu bằng ITQ-55, quá trình phân tách này có thể được thực hiện dưới các điều kiện thích hợp bất kỳ, miễn là nhiệt độ đủ thấp để về cơ bản tối thiểu hóa sự hấp phụ của các hydrocarbon.

f) phân tách NO_2 khỏi SO_2 . Quá trình phân tách này có thể được thực hiện tùy ý tại nhiệt độ môi trường xung quanh hoặc lớn hơn như phân tách động học hoặc phân tách cân bằng. Theo cách thay thế, việc phân tách có thể được thực hiện tại các nhiệt độ nhỏ hơn môi trường xung quanh.

g) phân tách HCl , HBr , Cl_2 , và/hoặc Br_2 ra khỏi các thành phần khác.

h) phân tách N_2 ra khỏi metan, khí tự nhiên, khí tự nhiên dạng lỏng (C_2^+), các hydrocarbon khác, và/hoặc các hợp chất hữu cơ khác có ba hoặc nhiều hơn ba nguyên tử nặng (tức là, các nguyên tử khác hydro). Do quá trình hấp phụ thấp hoặc giảm thiểu các hydrocarbon bằng ITQ-55, quá trình phân tách này có thể được thực hiện dưới các điều kiện thích hợp bất kỳ, miễn là nhiệt độ đủ thấp để về cơ bản giảm thiểu sự hấp phụ các hydrocarbon. Ngoài ra hoặc thay thế, việc phân tách có thể được thực hiện tại các điều kiện vận hành thích hợp bất kỳ dựa trên độ chọn lọc theo động học. Điều này có thể trái ngược với các phương pháp truyền thống để phân tách N_2 ra khỏi các hydrocarbon hoặc các hợp chất hữu cơ, vì các phương pháp truyền thống thường bao gồm phân tách tại các điều kiện nhiệt độ thấp. Cần lưu ý rằng với khí tự nhiên, việc phân tách N_2 , H_2S , và/hoặc CO_2 ra khỏi khí tự nhiên có thể được thực hiện trước khi hóa lỏng khí tự nhiên, sau khi hóa lỏng khí tự nhiên, hoặc tổ hợp của chúng.

i) phân tách O_2 ra khỏi N_2 hoặc không khí. Quá trình phân tách này có thể được thực hiện tùy ý tại nhiệt độ môi trường xung quanh hoặc lớn hơn như phân tách theo động học hoặc phân tách cân bằng, hoặc tùy ý tại các nhiệt độ dưới nhiệt độ môi trường xung quanh. Trong một số khía cạnh, các điều kiện phân tách có thể ngược lại các phương pháp truyền thống để phân tách O_2 ra khỏi N_2 và không khí, vì các phương pháp truyền thống thường bao gồm phân tách tại các điều kiện nhiệt độ thấp.

j) phân tách khí tổng hợp. Một ví dụ là quá trình phân tách metan ra khỏi các thành phần khí tổng hợp khác, chẳng hạn như CO , CO_2 và H_2 , mà có thể được tạo

thuận lợi bằng việc hấp phụ được giảm hoặc giảm thiểu metan bởi ITQ-55. Ví dụ khác là phân tách H_2 ra khỏi các thành phần khí tổng hợp khác, mà có thể được thực hiện tùy ý như phân tách theo động học do đường kính động học nhỏ của H_2 . Tùy chọn, nước có thể được phân tách khỏi khí tổng hợp (chẳng hạn bằng cách giảm nhiệt độ để phân tách nước như một chất lỏng) để cải thiện độ chọn lọc cho việc tạo thành dòng sản phẩm H_2 .

k) phân tách CO ra khỏi metan và/hoặc các hợp chất khác. Do quá trình hấp phụ các hydrocarbon thấp hoặc giảm thiểu bằng ITQ-55, việc phân tách khỏi các hydrocarbon và/hoặc các hợp chất hữu cơ thông thường có thể được thực hiện dưới các điều kiện thích hợp bất kỳ, miễn là nhiệt độ đủ thấp để về cơ bản giảm thiểu sự hấp phụ của các hydrocarbon.

l) phân tách H_2 ra khỏi nước, các hydrocarbon, N_2 , CO_2 , NH_3 , CO, các thành phần khí khác, hoặc tổ hợp của chúng.

l) phân tách He ra khỏi nước, các hydrocarbon, khí tự nhiên, N_2 , CO_2 , CO, các thành phần khí khác, hoặc tổ hợp của chúng.

n) phân tách Ne, Ar, và/hoặc Kr ra khỏi không khí và/hoặc các thành phần khí khác.

o) phân tách NH_3 ra khỏi các thành phần với đường kính động học lớn và/hoặc ái lực thấp hơn với ITQ-55.

p) phân tách CO_2 ra khỏi metan và các hydrocarbon trọng lượng phân tử cao hơn trong dòng cấp khí tự nhiên.

q) phân tách H_2O ra khỏi metan và các hydrocarbon trọng lượng phân tử cao hơn trong dòng cấp khí tự nhiên.

r) phân tách N_2 ra khỏi metan và các hydrocarbon trọng lượng phân tử cao hơn trong dòng cấp khí tự nhiên.

s) phân tách H_2O , N_2 hoặc tổ hợp của chúng ra khỏi metan và các hydrocarbon trọng lượng phân tử cao hơn trong dòng cấp khí tự nhiên.

t) phân tách H_2S ra khỏi metan và các hydrocarbon trọng lượng phân tử cao hơn trong dòng cấp khí tự nhiên.

u) phân tách CS_2 và/hoặc COS ra khỏi các thành phần với đường kính động học lớn.

v) phân tách metanol và/hoặc dimetyl ete ra khỏi các hydrocarbon và các hợp chất hữu cơ trọng lượng phân tử cao hơn.

w) phân tách metanol và/hoặc dimetyl ete ra khỏi metan, etan, etylen, axetylen, và/hoặc formaldehyt.

x) phân tách metan hoặc etan ra khỏi các hydrocarbon trọng lượng phân tử cao hơn và các hợp chất hữu cơ.

y) phân tách H_2S và/hoặc H_2O ra khỏi metan và/hoặc các hydrocarbon trọng lượng phân tử cao hơn và/hoặc các hợp chất hữu cơ khác có ba hoặc nhiều hơn ba nguyên tử (không chứa hydro) nặng.

Các Quy trình Phân tách chất hấp phụ (bao gồm quy trình dao động)

Phân tách khí (hoặc phân tách chất lưu khác) là quan trọng trong nhiều ngành công nghiệp khác nhau và thông thường có thể được thực hiện bằng cách cho chảy hỗn hợp khí qua chất hấp phụ mà chúng ưu tiên hấp phụ thành phần dễ được hấp phụ hơn so với thành phần khó hấp phụ hơn của hỗn hợp. Hấp phụ dao động là ví dụ về kỹ thuật phân tách có giá trị lớn trong thương mại, chẳng hạn như hấp phụ dao động theo áp suất (pressure swing adsorption-PSA) hoặc hấp phụ dao động theo nhiệt độ (temperature swing adsorption-TSA). Các quy trình PSA dựa vào thực tế rằng dưới điều kiện áp suất, các chất lưu có xu hướng bị hấp phụ vào bên trong cấu trúc lỗ của vật liệu chất hấp phụ có lỗ rỗng li ti hoặc bên trong thể tích rỗng của vật liệu polyme. Áp suất càng cao, chất lưu được hấp phụ càng nhiều. Khi giảm áp suất, chất lưu được giải phóng hoặc được giải hấp thụ. Các quy trình PSA có thể được sử dụng để phân tách các chất lưu trong hỗn hợp bởi vì các chất lưu khác nhau có xu hướng điền đầy các lỗ rỗng li ti hoặc thể tích rỗng của chất hấp phụ với các mức độ khác nhau. Nếu hỗn hợp khí, ví dụ như khí tự nhiên, dưới điều kiện áp suất được đi qua bình chứa chứa chất hấp phụ polyme hoặc chất hấp phụ có lỗ rỗng li ti mà hỗn hợp khí điền đầy nitơ hơn so với metan, một phần hoặc tất cả nitơ sẽ ở lại trong lớp chất hấp phụ, và khí đi ra khỏi bình là giàu metan. Khi tầng chất hấp phụ gần hết khả năng hấp phụ nitơ của nó, nó có thể được tái tạo lại bằng cách giảm áp suất, nhờ đó giải phóng nitơ bị hấp phụ. Sau đó nó lại sẵn sàng cho chu trình khác.

Công nghệ phân tách chất lưu quan trọng khác là hấp phụ dao động theo nhiệt độ (TSA). Các quy trình TSA cũng dựa vào thực tế rằng dưới điều kiện áp suất, các

chất lưu có xu hướng bị hấp phụ vào bên trong cấu trúc lỗ của vật liệu chất hấp phụ có lỗ rỗng li ti hoặc bên trong thể tích rỗng của vật liệu polyme. Khi nhiệt độ của chất hấp phụ tăng, chất lưu được giải phóng hoặc được giải hấp phụ. Bằng cách dao động nhiệt độ theo chu kỳ của các tầng chất hấp phụ, các quy trình TSA có thể được sử dụng để phân tách các chất lưu trong hỗn hợp khi được sử dụng với chất hấp phụ mà nó lấy đi có chọn lọc một hoặc nhiều thành phần trong hỗn hợp chất lưu.

Ngoài ra để dao động áp suất và/hoặc nhiệt độ để hình thành dòng sản phẩm được hấp phụ, việc hình thành dòng sản phẩm được hấp phụ có thể là dễ dàng bằng cách cho chất hấp phụ tiếp xúc với dòng chất lưu di chuyển. Sau đó thực hiện phân tách bằng việc hấp phụ có chọn lọc thành phần ra khỏi dòng đầu vào, thành phần được hấp phụ chọn lọc có thể được giải hấp phụ ít nhất một phần bằng cách thay thế thành phần được hấp phụ chọn lọc bằng thành phần chất lưu khác mà có ái lực lớn hơn với chất hấp phụ. Thành phần chất lưu bổ sung có thể được đề cập đến như thành phần chất lưu thay thế. Tùy chọn, thành phần chất lưu thay thế có thể được phân tách dễ dàng khỏi thành phần được hấp phụ chọn lọc, chẳng hạn như bằng quá trình ngưng tụ và/hoặc phân tách pha.

Các chất hấp phụ cho các hệ thống PSA được chọn thường là các vật liệu rất rỗng bởi diện tích bề mặt lớn của chúng. Các chất hấp phụ điển hình là carbon hoạt tính, các gel silic oxit, các nhôm oxit và các zeolit. Trong một số trường hợp, có thể sử dụng vật liệu polyme làm chất hấp phụ. Mặc dù chất lưu được hấp phụ trên các bề mặt phía trong của các vật liệu có lỗ rỗng li ti có thể gồm một lớp duy nhất, hoặc tối đa là độ dày vài phân tử, các diện tích bề mặt vài trăm mét vuông trên một gam chất hấp phụ có khả năng hấp phụ phần đáng kể trọng lượng của chất hấp phụ trong khí. Các loại phân tử điền đầy chọn lọc vào các lỗ rỗng li ti hoặc thể tích mở của chất hấp phụ thường được đề cập như các thành phần "nặng" và các loại phân tử mà không điền đầy có chọn lọc vào các lỗ rỗng li ti hoặc thể tích mở của chất hấp phụ thường được đề cập như các thành phần "nhẹ".

Các loại hấp phụ dao động khác nhau có thể được sử dụng trong thực tế của sáng chế. Các ví dụ không hạn chế của các quy trình hấp phụ dao động gồm hấp phụ dao động nhiệt (TSA) và các loại quy trình hấp phụ dao động khác nhau gồm kỹ thuật hấp phụ dao động áp suất thông thường (PSA), và hấp phụ dao động áp suất riêng

phần hoặc hấp phụ dao động làm sạch nhờ thay thế (PPSA). Các quy trình hấp phụ dao động này có thể được điều khiển với các chu trình nhanh, trong trường hợp này chúng được đề cập là hấp phụ dao động nhiệt chu trình nhanh (RCTSA), hấp phụ dao động áp suất chu trình nhanh (RCPSA), và các công nghệ hấp phụ dao động áp suất riêng phần chu trình nhanh hoặc hấp phụ làm sạch nhờ thay thế chu trình nhanh (RCPPSA). Thuật ngữ các quy trình hấp phụ dao động sẽ được hiểu là gồm tất cả các quy trình này (cụ thể TSA, PSA, PPSA, RCTSA, RCPSA, và RCPPSA) gồm các sự kết hợp của các quy trình này. Các quy trình này yêu cầu tiếp xúc hiệu quả hỗn hợp khí với chất hấp phụ rắn.

Mặc dù bất kỳ bộ tiếp xúc chất hấp phụ thích hợp nào cũng có thể được sử dụng trong thực tế của sáng chế, gồm các bộ tiếp xúc chất hấp phụ thông thường, trong một số khía cạnh các bộ tiếp xúc có cấu trúc đường dẫn song song có thể được sử dụng. Cấu trúc của các bộ tiếp xúc đường dẫn song song, gồm các bề mặt được cố định mà trên đó chất hấp phụ hoặc vật liệu hoạt tính khác được giữ, có thể cung cấp những thuận lợi đáng kể so với các phương pháp phân tách khí truyền thống trước đó, chẳng hạn như các bình chứa chứa các giọt chất hấp phụ hoặc các hạt chất hấp phụ được ép đùn. Với các bộ tiếp xúc đường dẫn song song tổng thu hồi thành phần nhẹ (tức là, thành phần mà không được hấp phụ ưu tiên) đạt được trong quy trình hấp phụ dao động có thể là lớn hơn khoảng 80% thể tích, hoặc lớn hơn khoảng 85% thể tích, hoặc lớn hơn khoảng 90% thể tích, hoặc lớn hơn khoảng 95% thể tích của lượng thành phần nhẹ được đưa vào quy trình. Thu hồi thành phần nhẹ được định nghĩa là lưu lượng mol trung bình theo thời gian của thành phần nhẹ trong dòng sản phẩm chia cho lưu lượng mol trung bình theo thời gian của thành phần nhẹ trong dòng cấp. Tương tự, thu hồi thành phần nặng (tức là, thành phần mà được hấp phụ ưu tiên) được định nghĩa là lưu lượng mol trung bình theo thời gian của thành phần nặng trong dòng sản phẩm chia cho lưu lượng mol trung bình theo thời gian của thành phần nặng trong dòng cấp.

Các đường dẫn, đôi khi cũng được đề cập là "các đường dẫn dòng", "các đường dẫn dòng chất lưu" hoặc "các đường dẫn dòng khí" là các con đường trong bộ tiếp xúc cho phép khí hoặc chất lưu khác chảy qua. Thông thường, các đường dẫn dòng cung cấp sức cản chất lưu tương đối thấp kết hợp với diện tích bề mặt tương đối cao. Độ dài đường dẫn dòng nên đủ để cung cấp vùng chuyển khối mà ít nhất là một hàm của vận

tốc chất lưu, và tỷ lệ diện tích bề mặt trên thể tích đường dẫn. Các đường dẫn tốt hơn là được tạo kết cấu để tối thiểu hóa sự giảm áp suất trong các đường dẫn. Trong nhiều phương án, một phần dòng chất lưu đi vào đường dẫn ở đầu thứ nhất của bộ tiếp xúc không thông với phần chất lưu khác bất kỳ đi vào đường dẫn khác ở đầu thứ nhất cho tới các đoạn tái tổ hợp sau khi thoát ra khỏi đầu thứ hai. Quan trọng là độ đồng đều của đường dẫn để đảm bảo rằng về cơ bản tất cả các đường dẫn được sử dụng hoàn toàn, và vùng chuyển khối về cơ bản được chứa bằng nhau. Cả năng suất và độ tinh khiết của khí/chất lưu sẽ xấu đi nếu tính không nhất quán giữa các đường dẫn quá lớn. Nếu một đường dẫn dòng lớn hơn đường dẫn dòng kề nó, có thể xảy ra sự ngắt sản phẩm sớm, dẫn đến giảm độ tinh khiết của khí sản phẩm tới các mức tinh khiết không thể chấp nhận. Hơn nữa, các thiết bị vận hành ở các tần số chu trình lớn hơn khoảng 50 chu trình trên một phút (cpm) yêu cầu độ đồng nhất của đường dẫn dòng lớn hơn và giảm áp suất ít hơn so với các thiết bị vận hành ở số chu trình trên một phút là thấp. Hơn nữa, nếu xảy ra sự giảm áp suất quá nhiều qua tầng chất hấp phụ, thì các tần số chu trình cao hơn, chẳng hạn như trên mức lớn hơn 100cpm, là không dễ đạt được.

Kích thước và các dạng hình học của các bộ tiếp xúc đường dẫn song song có thể là bất kỳ kích thước hoặc dạng hình học nào thích hợp để sử dụng trong thiết bị quy trình hấp phụ dao động. Các ví dụ không giới hạn của các dạng hình học gồm các khối nguyên được tạo hình khác nhau có nhiều đường dẫn về cơ bản song song kéo dài từ một đầu của khối tới đầu kia; nhiều chi tiết dạng ống; các lớp được xếp chồng của các tấm chất hấp phụ có và không có các chi tiết đệm giữa mỗi tấm; các cuộn xoắn ốc nhiều lớp, các bó sợi rỗng, cũng như các bó sợi rắn cơ bản song song nhau. Chất hấp phụ có thể được phủ lên trên các hình dạng hình học này hoặc các hình dạng có thể, trong nhiều trường hợp, được tạo ra trực tiếp từ vật liệu chất hấp phụ cộng với chất kết dính thích hợp. Ví dụ về dạng hình học được tạo ra trực tiếp từ chất hấp phụ/chất kết dính sẽ là đúc ép vật liệu hỗn hợp của zeolit/polyme thành nguyên khối. Ví dụ khác của hình dạng hình học được tạo ra trực tiếp từ chất hấp phụ sẽ có thể được đúc ép hoặc được kéo sợi rỗng làm từ vật liệu hỗn hợp của zeolit/polyme. Ví dụ, dạng hình học mà được phủ chất hấp phụ sẽ có thể là tấm thép phẳng, mỏng được phủ màng chất hấp phụ có lỗ rỗng li ti, lỗ rỗng trung bình, màng chất hấp phụ, chẳng hạn như màng zeolit. Lớp chất hấp phụ được phủ hoặc được tạo ra trực tiếp có thể tự bản thân nó có

thể được tạo kết cấu thành nhiều lớp hoặc có thể là các vật liệu chất hấp phụ giống hoặc khác nhau. Các cấu trúc của tấm chất hấp phụ nhiều lớp được hướng dẫn trong công bố đơn sáng chế Mỹ số 2006/0169142, được đưa vào sáng chế này để tham khảo.

Kích thước của đường dẫn dòng có thể được tính toán từ sự cân nhắc việc giảm áp suất dọc theo đường dẫn dòng. Ưu tiên các đường dẫn dòng có độ hở của đường dẫn nằm trong khoảng từ khoảng 5 tới khoảng 1000 μm , tốt hơn là từ khoảng 50 tới khoảng 250 μm . Trong một số các ứng dụng RCPSA, các đường dẫn dòng được tạo ra khi các tấm chất hấp phụ được dát mỏng cùng nhau. Thông thường, các tấm dát mỏng chất hấp phụ cho các ứng dụng RCPSA có độ dài đường dẫn dòng nằm trong khoảng từ khoảng 0,5cm tới khoảng 10m, thông thường hơn độ dài đường dẫn dòng từ khoảng 10cm tới khoảng 1m và độ hở của đường dẫn trong khoảng từ khoảng 50 tới khoảng 250 μm . Các đường dẫn có thể chứa chi tiết đệm hoặc lưới mà hoạt động như là chi tiết đệm. Đối với các chất hấp phụ đã dát mỏng, có thể sử dụng các chi tiết đệm có cấu trúc hoặc vật liệu mà xác định sự phân tách giữa các tấm mỏng chất hấp phụ. Các ví dụ không giới hạn của dạng chi tiết đệm mà có thể được sử dụng trong sáng chế được bao gồm theo hướng chính xác: lưới chất dẻo, lưới kim loại, lưới thủy tinh, hoặc lưới carbon; màng chất dẻo hoặc lá kim loại; chỉ hoặc sợi chất dẻo, kim loại, thủy tinh, gốm hoặc carbon; cột gốm; khối cầu hoặc đĩa chất dẻo, thủy tinh, gốm hoặc kim loại; hoặc các tổ hợp của chúng. Các tấm mỏng chất hấp phụ đã được sử dụng trong các thiết bị hoạt động tại các tần số chu kỳ PSA lên đến ít nhất khoảng 150 chu trình mỗi phút (cpm). Độ dài đường dẫn dòng có thể tương ứng với tốc độ chu trình. Ở các tốc độ chu trình thấp hơn, như từ khoảng 20 tới khoảng 40cpm, độ dài đường dẫn dòng có thể chỉ cần dài bằng hoặc dài hơn 1m, thậm chí tới khoảng 10m. Đối với chu trình có tốc độ lớn hơn khoảng 40cpm, thì độ dài của đường dẫn dòng thường giảm đi, và có thể thay đổi từ khoảng 10cm tới khoảng 1m. Độ dài đường dẫn dòng dài hơn có thể được sử dụng cho các quy trình PSA theo chu trình. Các quy trình TSA theo chu trình nhanh có khuynh hướng chậm hơn so với các quy trình PSA theo chu trình nhanh và độ dài đường dẫn dòng dài hơn cũng có thể được sử dụng cho các quy trình TSA.

Trong các khía cạnh khác nhau, bộ tiếp xúc chất hấp phụ có chứa phần thể tích rất thấp các lỗ rỗng trung bình và các lỗ rỗng lớn mở. Ví dụ, các bộ tiếp xúc chất hấp phụ, chẳng hạn như bộ tiếp xúc chất hấp phụ cấu trúc dạng tầng, có thể chứa ít hơn

khoảng 20% thể tích, hoặc ít hơn khoảng 15% thể tích, hoặc ít hơn khoảng 10% thể tích, hoặc ít hơn khoảng 5% thể tích của thể tích rỗng của bộ tiếp xúc chất hấp phụ trong các lỗ rỗng mở nằm trong phạm vi kích thước lỗ rỗng trung bình và lỗ rỗng lớn. Các lỗ trung bình được định nghĩa bởi IUPAC (và được định nghĩa ở đây) là các lỗ rỗng có kích thước trong phạm vi kích thước từ 20 tới 500 Ångstrom. Các lỗ rỗng lớn được định nghĩa ở đây là các lỗ rỗng có kích thước lớn hơn 500 Ångstrom và nhỏ hơn 1µm. Cần lưu ý rằng các đường dẫn dòng trong bộ tiếp xúc để cho phép dòng khí (chất lưu) đầu vào được tiếp xúc với bộ tiếp xúc có thể thường là kích thước lớn hơn 1µm và do đó không được coi như là phần của thể tích lỗ rỗng lớn. Các lỗ rỗng mở được định nghĩa là các lỗ rỗng trung bình và lỗ rỗng lớn mà không bị chiếm giữ bởi chất chặn mà chúng có khả năng bị chiếm giữ, về cơ bản không có độ chọn lọc, bởi các thành phần của hỗn hợp khí. Các phương pháp thử nghiệm khác nhau như được mô tả dưới đây được sử dụng để đo phần thể tích của các lỗ rỗng mở trong bộ tiếp xúc phụ thuộc vào cấu trúc của bộ tiếp xúc.

Thử nghiệm ưu tiên để xác định phần thể tích của các lỗ rỗng trung bình và lỗ rỗng lớn mở của bộ tiếp xúc được định nghĩa như sau và gồm việc phân tích đường đẳng nhiệt của hơi ngưng tụ được hấp phụ bởi bộ tiếp xúc. Chất lỏng có áp suất hơi lớn hơn khoảng 13,332Pa (0,1torr) ở nhiệt độ thử nghiệm là vật liệu có thể được sử dụng để tạo ra hơi ngưng tụ được. Ở nhiệt độ khoảng 20°C, nước, hexan, trimetylbenzen, toluen, xylen, và isooctan có áp suất hơi đủ cao mà chúng có thể được sử dụng như hơi ngưng tụ. Trong nhánh hấp phụ của đường đẳng nhiệt, sự ngưng tụ mao dẫn điền đầy thể tích các lỗ rỗng li ti, lỗ rỗng trung bình và nhiều lỗ rỗng lớn bằng chất lỏng. Trong quá trình giải hấp phụ, các lỗ rỗng li ti, lỗ rỗng trung bình, và các lỗ rỗng lớn đã được điền đầy bằng chất lỏng được làm rỗng. Người ta đã biết rằng có hiện tượng trễ giữa nhánh hấp phụ và nhánh giải hấp phụ của đường đẳng nhiệt. Phân tích chi tiết đường đẳng nhiệt hấp phụ nằm trong phương trình Kelvin được biết tới bởi người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực kỹ thuật này. Phân tích chi tiết cung cấp phép đo phần thể tích của lỗ rỗng trung bình và lỗ rỗng lớn trong chất hấp phụ được tạo cấu trúc và để mở rộng sự phân phối kích cỡ của các lỗ rỗng trung bình và các lỗ rỗng lớn mở.

Mặc dù thể tích lỗ rỗng mở của bộ tiếp xúc được xác định bằng phương pháp kiểm tra đã mô tả ở trên, có thể sử dụng kính hiển vi điện tử quét để xác định thêm thể tích tương đối của các lỗ rỗng trung bình và lỗ rỗng lớn trong mẫu. Khi sử dụng kính hiển vi điện tử quét, bề mặt cũng như mặt cắt ngang của bộ tiếp xúc được tạo ảnh.

Thể tích lỗ rỗng trung bình và lỗ rỗng lớn mở gồm phần thể tích của tất cả lỗ rỗng trung bình và lỗ rỗng lớn không được điền đầy bằng chất chặn tùy ý, và chúng không có độ chọn lọc và do đó có khả năng bị chiếm một cách cơ bản bởi tất cả các thành phần của hỗn hợp khí. Các ví dụ không giới hạn về các chất chặn có thể được sử dụng trong thực tiễn của sáng chế gồm các polyme, vật liệu có lỗ rỗng li ti, các hydrocarbon rắn, và các chất lỏng có thể điền đầy không gian lỗ rỗng trung bình và lỗ rỗng lớn mở nhưng vẫn cho phép các phân tử vận chuyển vào bên trong các lỗ rỗng li ti trong chất hấp phụ chọn lọc. Khi chất chặn là polyme hoặc chất lỏng, ưu tiên kích thước phân tử của chất chặn đủ lớn để nó không xâm chiếm đáng kể vào các lỗ rỗng li ti của chất hấp phụ, nhưng không quá lớn mà không điền được lỗ rỗng trung bình và lỗ rỗng lớn. Khi các chất chặn dạng rắn được sử dụng kích thước hạt của chất rắn lớn hơn so với bất cứ lỗ rỗng li ti chọn lọc nào trong chất hấp phụ nhưng nhỏ hơn lỗ rỗng trung bình và lỗ rỗng lớn. Bằng cách đó chất chặn có thể vừa vận bên trong các lỗ rỗng trung bình và các lỗ rỗng lớn mà về cơ bản không chiếm giữ hoặc điền đầy các lỗ rỗng li ti mà nó có thể có mặt trong chất hấp phụ.

Chất chặn điền đầy lỗ rỗng trung bình và lỗ lớn mở của chất hấp phụ tới mức phần thể tích của các lỗ rỗng trung bình và lỗ rỗng lớn mở của chất hấp phụ đáp ứng các yêu cầu đã đề cập ở trên. Các ví dụ không giới hạn về các polyme có thể được sử dụng làm các chất chặn gồm polyamit, polysulfon, và cao su silicon. Các ví dụ không giới hạn về các chất lỏng có thể được sử dụng làm các chất chặn gồm amin, các chất thơm như 1,3,5 trimetylbenzen và hydrocarbon no có nhánh như heptametylnonan cũng như các hydrocarbon lỏng có số nguyên tử carbon nằm trong khoảng 5 tới 60. Khi chất chặn dạng lỏng được sử dụng có thuận lợi đối với khí cấp bão hòa hoặc gần bão hòa với chất chặn dạng lỏng. Các ví dụ không giới hạn về các chất chặn dạng rắn gồm các hydrocarbon như sáp và các hydrocarbon có số nguyên tử carbon trong khoảng từ 10 tới 1000. Các ví dụ không giới hạn về các vật liệu lỗ rỗng li ti mà có thể được sử dụng trong thực tế của sáng chế gồm carbon và zeolit có lỗ rỗng li ti có kích

thước lỗ lớn hơn các kích thước lỗ của chất hấp phụ có cấu trúc chọn lọc của sàng chế. Ví dụ chất hấp phụ được tạo thành cùng với chất chặn là lớp zeolit được liên kết silic oxit hoặc nhôm oxit có khoảng 30% thể tích lỗ rỗng trung bình và lỗ rỗng lớn trong các kẽ hở giữa các hạt zeolit mà được điền đầy bằng chất lỏng để về cơ bản điền đầy tất cả các khoảng trống bằng chất lỏng (cụ thể, tổng độ rỗng trung bình và độ rỗng lớn thu được là nhỏ hơn khoảng 20%). Trong một số trường hợp, chất chặn tạo ra mạng lưới liên tục và chất hấp phụ là cấu trúc hỗn hợp với vật liệu có lỗ rỗng li ti được nhúng trong chất chặn. Ví dụ không giới hạn về cấu trúc là vật liệu hỗn hợp zeolit/polyme tại đó polyme là liên tục và vật liệu hỗn hợp có các lỗ rỗng trung bình và các lỗ rỗng lớn mở nhỏ hơn khoảng 20% thể tích.

Cũng có thể tạo thành chất hấp phụ sử dụng vật liệu lỗ rỗng trung bình mà điền đầy các lỗ rỗng lớn để làm giảm toàn bộ khoảng trống, hoặc lỗ mở, thể tích. Ví dụ về cấu trúc này có thể sẽ là chất hấp phụ có khoảng 30% thể tích lỗ rỗng lớn được điền đầy bằng sol-gel lỗ rỗng trung bình để thể tích các lỗ rỗng trung bình và lỗ rỗng lớn thu được là nhỏ hơn khoảng 20% thể tích.

Ví dụ về quy trình mà cấu trúc chất hấp phụ bao gồm ITQ-55 có thể được sử dụng là quy trình hấp phụ dao động. Quy trình hấp phụ dao động có thể bao gồm bước hấp phụ được theo sau bởi bước giải hấp phụ để thu hồi thành phần được hấp phụ. Trong suốt bước hấp phụ, các thành phần "nặng" được hấp phụ chọn lọc và các thành phần được hấp phụ yếu (tức là, các thành phần "nhẹ") đi qua tầng hấp phụ để tạo ra khí sản phẩm. Có thể loại bỏ hai hoặc nhiều tạp chất một cách đồng thời nhưng để thuận tiện, thành phần hoặc các thành phần, mà được loại bỏ bằng hấp phụ có chọn lọc sẽ được đề cập ở dạng số ít và được đề cập là tạp chất hoặc thành phần nặng. Trong quy trình hấp phụ dao động, hỗn hợp khí được đi trên tầng chất hấp phụ thứ nhất trong bình chứa thứ nhất và dòng sản phẩm đã được làm giàu thành phần nhẹ nổi lên từ tầng này được lấy hết tạp chất, hoặc thành phần nặng, mà duy trì hấp phụ trong tầng. Sau thời gian đã định, hoặc trường hợp khi quan sát thấy dòng hỗn hợp khí đi xuyên qua tạp chất hoặc thành phần nặng, dòng hỗn hợp khí được chuyển vào tầng hấp phụ thứ hai trong bình chứa thứ hai để tiếp tục làm sạch. Trong khi tầng thứ hai đảm nhiệm việc hấp phụ, thì tạp chất hoặc thành phần nặng đã bị hấp phụ được loại bỏ khỏi tầng hấp phụ thứ nhất bằng cách giảm áp suất. Theo một số phương án, kèm theo sự giảm

áp suất là dòng khí chảy ngược để hỗ trợ sự giải hấp thành phần nặng. Vì áp suất trong các bình chứa bị giảm đi, thành phần nặng đã bị hấp phụ trước đó trong tầng hấp phụ được giải hấp tăng lên đối với dòng sản phẩm giàu thành phần nặng. Khi giải hấp hoàn thành, tầng chất hấp phụ có thể được làm sạch bằng dòng khí trơ, ví dụ nitơ hoặc dòng làm sạch của khí quy trình. Quá trình làm sạch cũng có thể được tạo điều kiện dễ dàng nhờ sử dụng dòng khí sạch có nhiệt độ cao hơn dòng cấp của quy trình.

Sau khi đi xuyên qua tầng thứ hai và sau khi tầng thứ nhất được tái tạo để nó lại sẵn sàng đảm nhận việc hấp phụ trở lại, dòng hỗn hợp khí được chuyển lại sang tầng thứ nhất, và tầng thứ hai được tái tạo. Tổng thời gian chu trình là độ dài thời gian từ khi hỗn hợp khí được dẫn đầu tiên tới tầng thứ nhất trong chu trình thứ nhất tới thời điểm khi hỗn hợp khí được dẫn trước tiên tới tầng thứ nhất trong chu trình kế ngay sau; tức là, sau khi tái tạo đơn lẻ tầng thứ nhất. Việc sử dụng các bình chứa thứ ba, thứ tư, thứ năm, v.v. ngoài bình chứa thứ hai có thể đóng vai trò làm tăng thời gian chu trình khi thời gian hấp phụ là ngắn nhưng thời gian giải hấp phụ là dài.

Trong một số khía cạnh, quy trình RCPSA có thể được sử dụng cho quá trình phân tách. Tổng thời gian chu trình RCPSA có thể nhỏ hơn khoảng 30 giây, tốt hơn là nhỏ hơn 15 giây, tốt hơn nữa là nhỏ hơn 10 giây, thậm chí tốt hơn nữa nhỏ hơn 5 giây, và thậm chí tốt hơn nữa là nhỏ hơn 1 giây. Hơn nữa, các bộ phận hấp phụ dao động áp suất theo chu kỳ nhanh có thể sử dụng các chất hấp phụ cơ bản khác nhau, chẳng hạn như, nhưng không giới hạn, các vật liệu có cấu trúc nguyên khối, dát mỏng, và các sợi rỗng.

Bộ tiếp xúc chất hấp phụ có thể chứa tùy ý vật liệu khối nhiệt (truyền nhiệt) để giúp điều khiển việc làm nóng và làm nguội chất hấp phụ trong bộ tiếp xúc trong suốt cả hai bước hấp phụ và bước giải hấp phụ của quy trình hấp phụ dao động áp suất. Việc làm nóng trong suốt quá trình hấp phụ bị gây ra bởi nhiệt của sự hấp phụ các phân tử đi vào chất hấp phụ. Vật liệu khối nhiệt tùy ý cũng giúp điều khiển quá trình làm mát bộ tiếp xúc trong suốt bước giải hấp phụ. Khối nhiệt có thể được đưa vào các đường dẫn dòng của bộ tiếp xúc, được đưa vào trong chính chất hấp phụ, hoặc được đưa vào như là một phần của thành của các đường dẫn dòng. Khi được đưa vào trong chất hấp phụ, khối nhiệt có thể là vật liệu dạng rắn được phân bố trong khắp lớp chất hấp phụ hoặc nó có thể được chứa như một lớp trong chất hấp phụ. Khi nó được đưa

vào như một phần của thành của đường dẫn dòng, chất hấp phụ được kết tủa hoặc được tạo ra trên thành. Bất kỳ vật liệu phù hợp nào có thể được sử dụng như vật liệu khối nhiệt trong thực tế của sáng chế này. Các ví dụ không giới hạn về các vật liệu như vậy gồm kim loại, gốm, và các polyme. Các ví dụ không giới hạn về các kim loại được ưu tiên gồm hợp kim thép, đồng, và các hợp kim nhôm. Các ví dụ không giới hạn về gốm được ưu tiên gồm silic oxit, nhôm oxit, và ziricon oxit. Ví dụ về polyme được ưu tiên có thể được sử dụng trong thực tế của sáng chế là polyimide. Phụ thuộc vào sự tăng nhiệt độ tới mức được giới hạn trong suốt bước hấp phụ, lượng vật liệu khối nhiệt được sử dụng có thể bằng khoảng từ 0 tới 25 lần trọng lượng của chất hấp phụ có lỗ rỗng li ti của bộ tiếp xúc. Khoảng được ưu tiên cho lượng khối nhiệt trong bộ tiếp xúc nằm bằng khoảng từ 0 tới 5 lần trọng lượng của chất hấp phụ có lỗ rỗng li ti của bộ tiếp xúc. Khoảng được ưu tiên hơn cho lượng vật liệu khối nhiệt sẽ nằm trong khoảng từ 0 tới 2 lần trọng lượng vật liệu hấp phụ có lỗ rỗng li ti, tốt nhất bằng khoảng từ 0 tới 1 lần trọng lượng của vật liệu hấp phụ có lỗ rỗng li ti của bộ tiếp xúc.

Tốc độ hấp phụ tổng thể của các quy trình hấp phụ dao động được đặc trưng bởi tốc độ chuyển khối từ đường dẫn dòng vào chất hấp phụ. Có mong muốn để có tốc độ chuyển khối của các loại được loại bỏ (cụ thể thành phần nặng) đủ lớn để hầu hết thể tích của chất hấp phụ được sử dụng trong quy trình. Vì chất hấp phụ loại bỏ chọn lọc thành phần nặng khỏi dòng khí, sử dụng không hiệu quả lớp chất hấp phụ có thể làm giảm đi sự thu hồi thành phần nhẹ và/hoặc giảm đi độ tinh khiết của dòng sản phẩm nhẹ. Với việc sử dụng các bộ tiếp xúc chất hấp phụ được mô tả ở đây, có thể tạo chất hấp phụ có phần thể tích của các lỗ rỗng trung bình và lỗ rỗng lớn thấp sao cho hầu hết thể tích của chất hấp phụ, mà sẽ nằm trong phạm vi của lỗ rỗng li ti, được sử dụng hiệu quả trong hấp phụ và giải hấp thành phần nặng. Một cách thực hiện điều này để có chất hấp phụ có độ dày về cơ bản là đồng đều ở đó độ dày của lớp chất hấp phụ được thiết lập bằng các hệ số chuyển khối của thành phần nặng và thời gian của các bước hấp phụ và giải hấp của quy trình. Độ đồng nhất về độ dày có thể được đánh giá từ các phép đo độ dày của chất hấp phụ hoặc từ cách mà nó được tạo ra. Ưu tiên độ đồng nhất của chất hấp phụ sao cho độ lệch chuẩn độ dày của nó nhỏ hơn khoảng 25% độ dày trung bình. Tốt hơn nữa là, độ lệch chuẩn của độ dày chất hấp phụ là nhỏ hơn

khoảng 15% độ dày trung bình. Thậm chí ưu tiên hơn độ lệch chuẩn của độ dày chất hấp phụ nhỏ hơn khoảng 5% độ dày trung bình.

Việc tính toán các hằng số tốc độ chuyển khối này đã biết bởi người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực kỹ thuật và có thể cũng được suy ra bởi người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực kỹ thuật từ dữ liệu thử nghiệm tiêu chuẩn. Tài liệu D. M. Ruthven & C. Thaeron, Performance of a Parallel Passage Absorbent Contactor, Separation and Purification Technology 12 (1997) 43-60, mà được đưa vào sáng chế này để tham khảo, làm rõ nhiều khía cạnh về cách chuyển khối ảnh hưởng bởi độ dày của chất hấp phụ, độ hở đường dẫn và thời gian chu trình của quy trình. Tương tự, Patent Mỹ số 6,607,584 của Moreau cùng cộng sự, cũng được đưa vào đây để tham khảo, mô tả chi tiết việc tính toán các tốc độ chuyển khối này và các hệ số liên quan đối với một chất hấp phụ đã cho và các chế phẩm tiêu chuẩn thử nghiệm được sử dụng cho PSA truyền thống.

Fig.6 thể hiện bộ tiếp xúc đường dẫn song song dưới dạng nguyên khối được tạo thành trực tiếp từ chất hấp phụ có lỗ rỗng li ti cộng với chất kết dính và chứa nhiều đường dẫn dòng song song. Có thể tạo trực tiếp nhiều hình dạng nguyên khối bằng các quy trình đúc ép. Ví dụ về dạng nguyên khối hình trụ 1 được thể hiện dạng giản đồ trên Fig.6. Nguyên khối hình trụ 1 chứa nhiều đường dẫn dòng song song 3. Các đường dẫn dòng 3 này có thể có độ hở của đường dẫn nằm trong khoảng từ khoảng 5 tới khoảng 1000 μ m, tốt hơn là trong khoảng từ khoảng 50 tới khoảng 250 μ m, miễn là tất cả các đường dẫn của bộ tiếp xúc đã cho về cơ bản có cùng kích thước độ hở đường dẫn. Có thể tạo ra các đường dẫn có nhiều hình dạng khác nhau gồm, nhưng không bị giới hạn, là hình tròn, vuông, tam giác, và lục giác. Khoảng trống giữa các đường dẫn được chiếm bởi chất hấp phụ 5. Như được thể hiện, đường dẫn 3 chiếm khoảng 25% thể tích nguyên khối và chất hấp phụ 5 chiếm khoảng 75% thể tích nguyên khối. Chất hấp phụ 5 có thể chiếm từ khoảng 50% tới khoảng 98% thể tích nguyên khối. Độ dày hữu hiệu của chất hấp phụ có thể được xác định từ tỷ lệ phần thể tích bị chiếm bởi chất hấp phụ 5 và cấu trúc đường dẫn như sau:

Độ dày hữu hiệu của chất hấp phụ = $\frac{1}{2}$ Đường kính đường dẫn * (Phần thể tích của chất hấp phụ) / (Phần thể tích của các đường dẫn)

Với nguyên khối của Fig.6, độ dày hữu hiệu của chất hấp phụ sẽ bằng khoảng 1,5 lần đường kính của đường dẫn cấp. Khi đường kính đường dẫn nằm trong khoảng từ khoảng 50 tới khoảng 250 μm , trong trường hợp mà toàn bộ tiếp xúc không bao gồm chất hấp phụ, ưu tiên độ dày lớp chất hấp phụ, nằm trong khoảng từ khoảng 25 tới khoảng 2500 μm . Đối với đường dẫn có đường kính 50 μm , khoảng độ dày được ưu tiên cho lớp chất hấp phụ nằm trong khoảng từ khoảng 25 tới khoảng 300 μm , khoảng được ưu tiên hơn nữa là từ khoảng 50 tới khoảng 250 μm . Fig.7 là mặt cắt ngang dọc theo trục chiều dọc thể hiện các đường dẫn cấp 3 kéo dài qua độ dài của nguyên khối với các thành của các đường dẫn dòng được tạo thành hoàn toàn từ chất hấp phụ 5 cộng với chất kết dính. Giảm đồ phóng to mặt cắt ngang nhỏ của các đường dẫn cấp 3 và lớp chất hấp phụ 5 của Fig.7 được thể hiện trên Fig.8 của nó. Lớp chất hấp phụ bao gồm chất hấp phụ có lỗ rỗng li ti hoặc polyme, hoặc các hạt 7, các hạt rắn (khối nhiệt) 9; mà hoạt động như một bộ phận gia nhiệt, chất chặn 13 và các lỗ rỗng trung bình và các lỗ rỗng li ti 11. Như được thể hiện, chất hấp phụ có lỗ rỗng li ti hoặc các hạt polyme 7 chiếm khoảng 60% thể tích của lớp chất hấp phụ và các hạt của khối nhiệt 9 chiếm khoảng 5% thể tích. Với thành phần này, độ rỗng (các đường dẫn dòng) bằng khoảng 55% thể tích bị chiếm bởi các chất hấp phụ có lỗ rỗng li ti hoặc các hạt polyme. Thể tích của chất hấp phụ có lỗ rỗng li ti 5 hoặc các hạt polyme 7 có thể nằm trong khoảng từ 25% thể tích của lớp chất hấp phụ tới khoảng 98% thể tích của lớp chất hấp phụ. Trong thực tế, phần thể tích của các hạt rắn 9 được sử dụng để điều chỉnh nhiệt sẽ nằm trong khoảng từ 0% tới khoảng 75%, tốt hơn là trong khoảng từ 5% tới khoảng 75%, và tốt hơn nữa là từ khoảng 10% tới khoảng 60% thể tích của lớp chất hấp phụ. Chất chặn 13 điền đầy không gian hoặc các chỗ trống còn lại giữa các hạt một lượng mong muốn để phần thể tích của các lỗ rỗng trung bình và các lỗ rỗng lớn mở 11 trong lớp chất hấp phụ 5 là nhỏ hơn khoảng 20%.

Khi nguyên khối được sử dụng trong quy trình phân tách khí dựa vào sự phân tách theo động học (chủ yếu là sự khuếch tán được điều khiển), quy trình này là thuận lợi đối với chất hấp phụ hoặc các hạt polyme có lỗ rỗng li ti 7 về cơ bản có kích thước giống nhau. Ưu tiên độ lệch chuẩn của thể tích của từng chất hấp phụ có lỗ rỗng li ti hoặc các hạt polyme 7 là ít hơn 100% thể tích hạt trung bình đối với các quy trình được điều khiển theo động học. Theo phương án được ưu tiên hơn độ lệch chuẩn của

thể tích của từng chất hấp phụ có lỗ rỗng li ti 7 hoặc các hạt polyme là nhỏ hơn 50% thể tích hạt trung bình. Sự phân bố theo kích thước hạt cho các chất hấp phụ zeolit có thể được điều chỉnh bằng phương pháp được sử dụng để tổng hợp các hạt. Cũng có thể phân tách các hạt chất hấp phụ có lỗ rỗng li ti được tổng hợp trước bằng kích thước sử dụng các phương pháp như cột lắng theo trọng lực. Cũng có thể là thuận lợi để sử dụng chất hấp phụ có lỗ rỗng li ti hoặc các hạt polyme được tạo kích thước đồng đều trong các quá trình phân tách được điều khiển ở trạng thái cân bằng.

Có vài cách mà có thể tạo ra nguyên khối trực tiếp từ chất hấp phụ có lỗ rỗng li ti được tạo cấu trúc. Ví dụ, khi chất hấp phụ có lỗ rỗng li ti là zeolit, có thể tạo ra nguyên khối bằng cách đúc ép hỗn hợp nước chứa lượng hiệu quả chất kết dính dạng rắn, zeolit và chất hấp phụ, các hạt điều chỉnh nhiệt dạng rắn, và polyme. Chất kết dính dạng rắn có thể là silic oxit hoặc nhôm oxit dạng keo được định cỡ mà nó được sử dụng để gắn kết zeolit và các hạt điều chỉnh nhiệt dạng rắn với nhau. Lượng hiệu quả của chất kết dính dạng rắn sẽ thường nằm trong khoảng từ khoảng 0,5 tới khoảng 50% thể tích zeolit và các hạt điều chỉnh nhiệt dạng rắn được sử dụng trong hỗn hợp. Nếu mong muốn, các vật liệu chất kết dính silic oxit trong bước sau xử lý được chuyển hóa thành các zeolit sử dụng các kỹ thuật tổng hợp thủy nhiệt, và như thế, silic oxit thường không có mặt trong nguyên khối thành phẩm. Polyme được thêm tùy ý vào hỗn hợp để kiểm soát lưu biến và đưa ra độ bền đúc ép mới. Nguyên khối được đúc ép được xử lý bằng cách nung nó trong lò, ở đó nước bay hơi và polyme cháy sạch, do đó thu được nguyên khối có thành phần mong muốn. Sau khi nung nguyên khối, lớp chất hấp phụ 5 sẽ có từ khoảng 20 tới khoảng 40% thể tích các lỗ rỗng trung bình và lỗ rỗng lớn. Một lượng định trước của các lỗ rỗng này có thể được điền đầy bằng chất chặn 13, như đã thảo luận ở trên, trong bước tiếp theo như bước tắm trong chân không.

Phương pháp khác có thể tạo trực tiếp nguyên khối từ chất hấp phụ có lỗ rỗng li ti bằng cách đúc ép hỗn hợp chất hấp phụ có lỗ rỗng li ti và polyme. Các chất hấp phụ có lỗ rỗng li ti được ưu tiên để sử dụng trong quy trình đúc ép là các zeolit và các chất sàng phân tử carbon. Các ví dụ không giới hạn về các polyme thích hợp cho quy trình đúc ép gồm các epoxy, các chất dẻo nóng, và các polyme lưu hóa như các loại cao su silicon có thể được đúc ép mà không cần dung môi bổ sung. Khi các polyme này được

sử dụng trong quy trình đúc ép, sản phẩm thu được sẽ ưu tiên có phần thể tích nhỏ của các lỗ rỗng trung bình và lỗ rỗng lớn trong lớp chất hấp phụ.

Fig.9 ở đây thể hiện bộ tiếp xúc đường dẫn song song 101 của sáng chế dưới dạng nguyên khối được phủ mà lớp chất hấp phụ được phủ lên trên các thành của đường dẫn dòng của nguyên khối được tạo thành. Với các bộ tiếp xúc đường dẫn song song trên Fig.9, quy trình đúc ép được sử dụng để tạo ra nguyên khối từ vật liệu rắn không hấp phụ thích hợp, ưu tiên kim loại như thép, hoặc gốm như cordierite, hoặc vật liệu carbon. Thuật ngữ "vật liệu rắn không hấp phụ" chúng ta hiểu là vật liệu rắn không được sử dụng làm chất hấp phụ chọn lọc cho bộ tiếp xúc đường dẫn song song. Lượng và độ dày hữu hiệu của lớp men gốm hoặc men kim loại, hoặc lớp phủ sol gel, 119 tốt hơn là được phết để làm kín một cách hiệu quả các thành của đường dẫn của nguyên khối. Các lớp men này có thể được phết bằng cách phủ huyền phù lên các thành đường dẫn, bởi bất cứ phương thức thông thường thích hợp nào, sau đó nung nguyên khối trong lò.

Phương pháp khác để phết sol gel lên các thành của đường dẫn sau khi nung dưới các điều kiện làm đặc lớp phủ. Cũng có thể sử dụng các công nghệ tẩm trong chân không và áp suất để phết lớp men hoặc sol gel lên các thành của đường dẫn. Trong các trường hợp đó, men hoặc sol gel sẽ thấm vào cấu trúc lỗ của nguyên khối 17. Trong tất cả các trường hợp, lớp men bịt kín thành của đường dẫn sao cho khí chảy qua đường dẫn không dễ dàng truyền vào trong thân của nguyên khối. Lớp chất hấp phụ 105 sau đó được phết đồng đều lên các thành đã được làm kín của các đường dẫn. Lớp chất hấp phụ 105 làm giảm lỗ mở, hoặc lỗ rò, của các đường dẫn, do đó đường dẫn dòng 103 được sử dụng trong các quy trình hấp phụ dao động là đường dẫn mở còn lại bên trong của lớp phủ. Các đường dẫn dòng 103 này có thể có độ hở của đường dẫn như đã định nghĩa ở trên. Lớp chất hấp phụ 105 có thể được đặt trên các thành của đường dẫn dòng bằng bất cứ phương pháp thích hợp nào như lớp phủ, hoặc lớp xen giữa. Các ví dụ không giới hạn về các phương pháp này bao gồm các kỹ thuật phủ pha chất lưu, chẳng hạn như phủ huyền phù đặc và phủ bột nhão. Các dung dịch phủ có thể bao gồm ít nhất chất hấp phụ có lỗ rỗng li ti hoặc các hạt polyme, chất tạo độ nhớt như rượu polyvinyl, các chất rắn truyền nhiệt (khối nhiệt) và chất kết dính tùy ý. Có thể không cần chất rắn truyền nhiệt bởi vì thân nguyên khối 101 bản thân nó có thể hoạt

động như chất rắn truyền nhiệt bằng cách lưu trữ và giải phóng nhiệt trong các bước khác nhau của chu trình quy trình phân tách. Trong trường hợp này, nhiệt khuếch tán qua lớp chất hấp phụ 105 và vào thân của nguyên khối 101. Nếu chất tạo độ nhớt, như rượu polyvinyl, được sử dụng thì khi nung lớp phủ trong lò, nó sẽ thường cháy hết. Có thể thuận lợi khi sử dụng chất kết dính như silic oxit dạng keo hoặc nhôm oxit dạng keo để tăng độ bền cơ học của lớp phủ đã nung. Các lỗ rỗng trung bình hoặc lỗ rỗng lớn thường chiếm giữ từ khoảng 20 tới khoảng 40% thể tích của lớp phủ đã được xử lý. Lượng hiệu quả của chất chặn được đưa vào để hoàn thành lớp chất hấp phụ để sử dụng. Chúng ta hiểu lượng hiệu quả của chất chặn là lượng cần đủ để chiếm các lỗ rỗng trung bình và lỗ rỗng lớn để lớp phủ thu được chứa ít hơn khoảng 20% thể tích lỗ rỗng của nó trong các lỗ rỗng trung bình và lỗ rỗng lớn.

Nếu sử dụng phương pháp tạo màng thủy nhiệt, các kỹ thuật phủ đã sử dụng có thể là rất giống với phương pháp mà trong đó các màng zeolit được tạo ra. Ví dụ về phương pháp phát triển lớp zeolit được hướng dẫn trong Patent Mỹ số 7,049,259, mà được kết hợp trong sáng chế này để tham khảo. Các lớp zeolit được phát triển bằng sự tổng hợp thủy nhiệt trên các lớp nền thường có các khe nứt và các biên hạt mà có kích thước lỗ rỗng trung bình và lỗ rỗng lớn. Thể tích của các lỗ rỗng này thường nhỏ hơn khoảng 10% thể tích của độ dày màng và thường có khoảng cách đặc trưng, hoặc khoảng hở giữa các khe nứt. Do đó, thường sử dụng trực tiếp các lớp màng được phát triển như nói ở trên làm lớp chất hấp phụ mà không cần chất chặn.

Fig.10 thể hiện bộ tiếp xúc đường dẫn song song của sáng chế trong đó các đường dẫn song song được tạo ra từ các tấm được dát mỏng chứa vật liệu chất hấp phụ. Có thể sử dụng các lớp mỏng, các tấm dát mỏng, hoặc lớp mỏng dạng tấm uốn sóng trong các quy trình PSA RCPSA, PPSA hoặc RCPPSA. Các tấm dát mỏng đã biết đến trong kỹ thuật và được bộc lộ trong đơn sáng chế Mỹ số US20060169142 A1 và Patent Mỹ số 7,094,275, mà được kết hợp trong sáng chế này để tham khảo. Khi chất hấp phụ được phủ lên trên cấu trúc hình học hoặc các thành phần của cấu trúc hình học được dát mỏng cùng nhau, chất hấp phụ có thể được phết sử dụng kỹ thuật phủ pha lỏng thích hợp bất kỳ. Các ví dụ không giới hạn của các kỹ thuật phủ pha lỏng có thể được sử dụng trong thực tế của sáng chế gồm phủ huyền phù đặc, phủ nhúng, phủ trơn, phủ quay, sự tạo màng thủy nhiệt và phát triển thủy nhiệt. Khi cấu trúc hình

học được tạo ra từ sản phẩm dát mỏng, có thể tạo sản phẩm dát mỏng từ bất cứ vật liệu nào mà chất hấp phụ theo sáng chế có thể được phủ. Việc phủ có thể được thực hiện trước hoặc sau khi vật liệu được dát mỏng. Trong tất cả các trường hợp này chất hấp phụ được phủ trên vật liệu mà nó được sử dụng cho dạng hình học của bộ tiếp xúc. Các ví dụ không giới hạn đối với các vật liệu này gồm các sợi thủy tinh, các sợi thủy tinh được nghiền, vải sợi thủy tinh, thủy tinh dạng sợi, vải thưa sợi thủy tinh, các sợi gốm, lưới dây đan bằng kim loại, kim loại giãn nở, kim loại được dập nổi, các vật liệu được xử lý bề mặt gồm các kim loại được xử lý bề mặt, lá kim loại, lưới kim loại, sợi carbon, các vật liệu xenluloza, các vật liệu polyme, các sợi rỗng, các lá kim loại, các bề mặt trao đổi nhiệt, và các tổ hợp của các vật liệu này. Các giá đỡ thường có hai bề mặt đối diện chính, và một hoặc cả hai mặt bề mặt này có thể được phủ bằng chất hấp phụ. Khi giá đỡ gồm các sợi rỗng, lớp phủ mở rộng quanh chu vi của sợi. Các tấm giá khác có thể là từng tấm được định cỡ, hoặc chúng có thể là tấm vật liệu liên tục. Độ dày của nền, cộng với chất hấp phụ hoặc vật liệu khác được phủ lên (như chất làm khô, chất xúc tác, v.v), thường nằm trong khoảng từ 10 μ m tới khoảng 2000 μ m, thông thường hơn là trong khoảng từ 150 μ m tới khoảng 300 μ m.

Fig.10 minh họa hình vẽ khai triển của phương án theo sáng chế trong đó có màng chất hấp phụ có lỗ rỗng li ti 505 trên mỗi mặt của cả hai bề mặt của lá kim loại phẳng 509, mà tốt hơn là được chế tạo bằng kim loại chống gỉ như thép không gỉ. Các lá kim loại riêng rẽ 509 với các màng chất hấp phụ 505 được chế tạo để tạo ra bộ tiếp xúc đường dẫn song song 501. Các chi tiết đệm với kích thước thích hợp có thể đặt giữa các lá kim loại trong khi chế tạo bộ tiếp xúc để độ hở của đường dẫn 503 có kích thước được định trước. Tốt hơn là khoảng một nửa thể tích của đường dẫn cấp 503 được điền đầy bằng chi tiết đệm để giữ các tấm được cách nhau đều đặn.

Các giá lưới kim loại có thể cung cấp các tính chất nhiệt mong muốn là nhiệt dung và độ dẫn điện cao mà "đẳng nhiệt hoá" chu trình PSA, RCPSA, PPSA hoặc RCPPSA để giảm sự thay đổi nhiệt độ mà làm suy giảm quy trình khi được kiểm soát dưới các điều kiện đoạn nhiệt. Ngoài ra, các lá kim loại được sản xuất với sự kiểm soát kích cỡ độ dày có độ chính xác cao. Lá kim loại có thể gồm, nhưng không giới hạn, nhôm, thép, nickel, thép không gỉ hoặc các hợp kim của nó. Do đó cần phương pháp phủ lá kim loại bằng lớp chất hấp phụ mỏng có độ dày được kiểm soát

chính xác, với độ kết dính tốt cần thiết. Một phương pháp để thực hiện việc này là tổng hợp thủy nhiệt. Các phương thức phủ được sử dụng có thể là giống với cách mà màng zeolit được điều chế như đã thảo luận ở trên. Các lớp zeolit phát triển bằng tổng hợp thủy nhiệt trên các giá thường có các khe nứt mà là các lỗ rỗng trung bình và các lỗ rỗng lớn. Thể tích của các lỗ rỗng này thường nhỏ hơn khoảng 10% thể tích của độ dày màng và thường có khoảng cách đặc trưng giữa các khe nứt. Phương pháp khác để phủ lá kim loại bằng lớp phủ màng dày là phủ trượt hoặc phủ có dao cạo. Chất huyền phù đặc chứa nước của các hạt zeolit được điều chế sẵn, chất kết dính (ví dụ silic oxit hoặc nhôm oxit dạng keo), chất tạo độ nhớt như polyme dạng rượu polyvinyl đổ khuôn, ví dụ, lên trên lá kim loại và được đốt để loại bỏ polyme và lưu hóa chất kết dính và zeolit. Sản phẩm, sau khi đốt, là màng zeolit được liên kết trên lá kim loại thường chứa từ khoảng 30 tới khoảng 40% thể tích lỗ trống. Để tạo ra lớp chất hấp phụ thích hợp, các lỗ trống được điền đầy trong bước kế tiếp bằng cách phủ màng zeolit được liên kết bằng polyme hoặc đưa chất lỏng vào các lỗ trống của màng zeolit được liên kết. Sản phẩm cuối cùng, sau khi điền đầy các lỗ trống bằng polyme hoặc chất lỏng, sẽ là lớp chất thụ có các yêu cầu có các lỗ rỗng trung bình và lỗ rỗng lớn thấp theo sáng chế.

Phương pháp khác để phủ các lá kim loại bằng các tinh thể zeolit được chế tạo sẵn, hoặc các hạt có lỗ rỗng li ti, là phương pháp kết tủa điện di (electrophoretic deposition-EPD). EPD là kỹ thuật để đưa các lớp phủ có chất lượng cao có độ dày đồng đều lên các bề mặt kim loại. Phương pháp có thể được sử dụng để đưa các lớp phủ dạng hạt hữu cơ và vô cơ lên các nền dẫn điện. Các chế phẩm huyền phù đặc chứa các zeolit được chế tạo sẵn, hoặc các hạt có lỗ rỗng li ti, có thể được đặt theo cách điện di lên vật liệu giá cứng, như bằng cách sử dụng phương pháp đã được mô tả trong đơn sáng chế Canada số 2,306,311 của Bowie Keefer và cộng sự, tựa đề "Adsorbent Laminate Structure" được kết hợp vào sáng chế này để tham khảo.

Một số dạng hình học của bộ tiếp xúc sẽ yêu cầu chất hấp phụ được đặt thành lớp lên bề mặt đường dẫn sử dụng vật liệu chất kết dính dạng keo hoặc toàn bộ dạng hình học của bộ tiếp xúc gồm chất hấp phụ cộng với chất kết dính dạng keo và chứa nhiều đường dẫn song song. Khi chất kết dính dạng keo được sử dụng, việc chọn lọc vật liệu dạng keo phụ thuộc vào chất hấp phụ cụ thể được sử dụng. Các vật liệu dạng

keo có khả năng thực hiện chức năng như chất kết dính và/hoặc mà tạo gel được ưu tiên. Các vật liệu dạng keo gồm, nhưng không giới hạn, các chất kết dính gốc silic oxit dạng keo, nhôm oxit dạng keo, ziriconi dioxit dạng keo, và các hỗn hợp của các vật liệu dạng keo. "Silic oxit dạng keo" đề cập tới sự phân tán ổn định của các hạt silic oxit vô định hình rời rạc có kích thước hạt nằm trong khoảng từ khoảng 1 tới khoảng 100nm. Các vật liệu silic oxit dạng keo thích hợp cũng có thể được biến đổi bề mặt, như bằng cách biến đổi bề mặt bằng nhôm oxit. Loại khác của chất kết dính dạng keo thích hợp cho việc sử dụng ở đây gồm các vật liệu đất sét, như palygorskite (cũng được biết đến là atapungit), chúng là các magie nhôm silicat hydrat hóa. Ngoài ra, các chất kết dính vô cơ có thể là chất trợ; tuy nhiên, các chất kết dính vô cơ nhất định như đất sét, được sử dụng với các chất hấp phụ zeolit có thể được chuyển hóa tại chỗ từ các chất kết dính cao lanh thành zeolit để zeolit được tự liên kết với vật liệu trợ tối thiểu. Trong các cấu trúc được liên kết này, các lỗ trống giữa các hạt keo tạo thành các lỗ rỗng trung bình và các lỗ trống giữa các hạt chất hấp phụ tạo thành các lỗ rỗng trung bình và/hoặc các lỗ rỗng lớn. Chất chặn có thể được dùng để điền đầy phần lớn độ rỗng trung bình và độ rỗng li ti trong các lớp được liên kết này để chất hấp phụ đáp ứng yêu cầu về thể tích lỗ rỗng mở của sáng chế. Các chất kết dính hữu cơ được sử dụng để liên kết các hạt carbon hoạt tính trong cấu trúc dát mỏng có thể được nhiệt phân để tạo chất hấp phụ chứa carbon hữu ích.

Trong một số khía cạnh, sẽ có giá trị trong ngành công nghiệp để cho phép phân tách các tạp chất nhất định ra khỏi dòng cấp khí tự nhiên. Một số tạp chất mà được đặc biệt quan tâm để loại bỏ như nước (H_2O), nitơ (N_2) và carbon dioxit (CO_2). Thuật ngữ "khí tự nhiên" hoặc "dòng cấp khí tự nhiên" như được sử dụng trong sáng chế là có ý để bao gồm khí tự nhiên như được chiết tại miệng giếng, khí tự nhiên mà được xử lý thêm, cũng như khí tự nhiên cho đường ống, công nghiệp, thương mại hoặc sử dụng trong dân cư.

Quan tâm đặc biệt ở đây là việc sử dụng các vật liệu ITQ-55 để loại bỏ tạp chất ra khỏi khí tự nhiên ở miệng giếng (hoặc sau một số bước tiền xử lý) để xử lý tiếp khí tự nhiên để đáp ứng các đặc điểm kỹ thuật cần thiết cho việc đưa khí thiên nhiên vào đường ống hoặc dùng trong công nghiệp, thương mại trung gian hoặc cuối cùng của nó hoặc dùng trong dân cư. Quan tâm đặc biệt là khả năng loại bỏ một hoặc nhiều tạp này

(H₂O, N₂, và/hoặc CO₂) tại các điều kiện áp suất xử lý giếng khí tự nhiên tương đối cao. Việc loại bỏ H₂O ra khỏi khí tự nhiên (cụ thể là, đặc biệt metan và các thành phần hydrocarbon trọng lượng phân tử cao hơn của khí tự nhiên) là quan trọng về khả năng xử lý tiếp khí tự nhiên trong các quy trình mà nước là bất lợi cho quy trình (ví dụ, phân tách ở nhiệt độ thấp các hydrocarbon trong dòng khí tự nhiên), cũng như về việc đáp ứng các đặc điểm kỹ thuật nhất định với các thành phần của khí tự nhiên. Việc loại bỏ N₂ ra khỏi khí tự nhiên (cụ thể là, đặc biệt metan và các thành phần hydrocarbon trọng lượng phân tử cao hơn của khí tự nhiên) là quan trọng để loại bỏ khí trơ trước khi xử lý tiếp khí tự nhiên trong các quy trình mà kết quả là về cơ bản giảm các yêu cầu về kích thước dung lượng của công trình xử lý một cách tổng thể, cũng như để đáp ứng các đặc điểm kỹ thuật nhất định với các thành phần của khí tự nhiên. Việc loại bỏ CO₂ ra khỏi khí tự nhiên (cụ thể là, đặc biệt metan và các thành phần hydrocarbon trọng lượng phân tử cao hơn của khí tự nhiên) là quan trọng để loại bỏ khí trơ trước khi xử lý tiếp khí tự nhiên trong các quy trình mà giảm các yêu cầu về kích thước dung lượng của công trình xử lý một cách tổng thể, cũng như để đáp ứng các đặc điểm kỹ thuật nhất định với các thành phần của khí tự nhiên.

Đó là lợi ích thực tế nếu loại bỏ những tạp chất này có thể được thực hiện tại các áp suất tương đối cao gần miệng giếng khí tự nhiên, như khí tự nhiên được sản xuất thường xuyên tại khoảng áp suất từ 1,500 đến 7,000psi (10,3MPa đến 48,3MPa); trong đó dòng cấp khí tự nhiên có thể được cấp đến các quy trình phân tách tại trên 300psi (2,1MPa), 500psi (3,4MPa), hoặc thậm chí 1000psi (6,9MPa), chẳng hạn như lên đến khoảng 2500psi (khoảng 17MPa) hoặc cao hơn. Có rất ít, nếu có, các vật liệu mà có thể vận hành một cách chắc chắn và hiệu quả để phân tách các tạp chất này ra khỏi metan và các hydrocarbon trọng lượng phân tử cao hơn khác dưới quy trình PSA, PPSA, RCPSA, RCPPSA, hoặc TSA (hoặc các quy trình chu trình tổ hợp chẳng hạn như PSA/TSA, PPSA/TSA, RCPSA/TSA, và RCPPSA/TSA, trong đó các bước từ mỗi quy trình được tổ hợp trong chu trình tổng thể) các điều kiện chu trình tại các điều kiện áp suất cao này. Một số lợi ích của việc thực hiện các việc phân tách này tại áp suất cao gồm có kích thước thiết bị nhỏ hơn (do thể tích khí nhỏ hơn ở áp suất cao) và khả năng sử dụng các dòng sản phẩm từ các quy trình phân tách này trong xử lý tiếp hoặc trong vận chuyển trong đường ống mà không cần hoặc không cần giảm thiết bị và năng

lượng yêu cầu để làm tăng áp lại (các) dòng sản phẩm phân tách thu được cho việc sử dụng tiếp này.

Trong các phương án của sáng chế, vật liệu ITQ-55 có thể được sử dụng trong các điều kiện PSA, PPSA, RCPSA, RCPPSA, TSA hoặc các điều kiện chu trình tổ hợp tại các áp suất nạp khí tự nhiên trong khoảng từ 5 đến khoảng 5,000psi (khoảng 0,03MPa đến khoảng 35MPa), khoảng 50 đến khoảng 3,000psi (khoảng 0,34MPa đến khoảng 21MPa), khoảng 100 đến khoảng 2,000psi (khoảng 0,69MPa đến khoảng 14MPa), khoảng 250 đến khoảng 1,500psi (khoảng 1,7MPa đến khoảng 10MPa), trên 50psi (0,34MPa), trên 250psi (1,7MPa), trên 500psi (3,4MPa), hoặc trên 1000psi (6,9MPa). Trong các phương án, sự vận hành nhiệt độ cấp khí tự nhiên có thể nằm trong khoảng từ khoảng 0 đến khoảng 750°F (khoảng -18°C đến khoảng 399°C), từ khoảng 100 đến khoảng 600°F (khoảng 38°C đến khoảng 316°C), hoặc từ khoảng 150 đến khoảng 500°F (khoảng 66°C đến khoảng 260°C).

Như có thể thấy trên Fig.17, và như được mô tả ở đầu đó trong sáng chế, vật liệu ITQ-55 thể hiện dung tích nước tăng theo hàm mũ tại áp suất cao hơn, trong khi các vật liệu khác được xem xét cho việc sử dụng này (cụ thể là, zeolit 5A) cho thấy chỉ có sự tăng lên rất nhỏ về dung tích nước tại áp suất cao. Như được thảo luận ở đầu đó trong sáng chế, ITQ-55 có ái lực hấp phụ rất cao với mỗi tạp chất này (H_2O , N_2 , và CO_2) trong khi đó đồng thời thể hiện sự hấp phụ rất thấp metan (CH_4) hoặc các hydrocarbon trọng lượng phân tử cao hơn. Vật liệu ITQ-55 có thể được sử dụng trong các quy trình dao động kết hợp này trong trạng thái phân tách cân bằng hoặc trạng thái phân tách theo động học. Trong các quy trình này, ITQ-55 trong silic oxit về cơ bản tinh khiết của nó có thể được sử dụng, hoặc ITQ-55 được sử dụng có thể có tỉ lệ Si/Al nằm trong khoảng từ 10:1 đến khoảng 1000:1, hoặc khoảng 50:1 đến khoảng 500:1.

Trong một số phương án quy trình dòng cấp khí tự nhiên, các điều kiện chu trình PSA, PPSA, RCPSA, RCPPSA, TSA hoặc các điều kiện chu trình tổ hợp được mô tả ở đây có thể được vận hành với chế độ trong đó Độ chọn lọc (như được định nghĩa trước là UA / UB ; trong đó $UA > UB$) là lớn hơn khoảng 5, lớn hơn khoảng 10, lớn hơn khoảng 50, hoặc thậm chí lớn hơn khoảng 100, và A là H_2O và B là metan hoặc các hydrocarbon trọng lượng phân tử cao hơn. Trong một số phương án khác cho quy trình dòng cấp khí tự nhiên, các điều kiện chu trình PSA, PPSA, RCPSA,

RCPPSA, TSA hoặc các điều kiện chu trình tổ hợp được mô tả ở đây có thể được vận hành với chế độ trong đó Độ chọn lọc (như được định nghĩa trước là UA / UB ; trong đó $UA > UB$) là lớn hơn khoảng 5, là lớn hơn khoảng 10, lớn hơn khoảng 50, hoặc thậm chí lớn hơn khoảng 100, và A là N_2 và B là metan hoặc các hydrocarbon trọng lượng phân tử cao hơn. Trong một số phương án khác nữa của quy trình dòng cấp khí tự nhiên, các điều kiện chu trình PSA, PPSA, RCPSA, RCPPSA, TSA hoặc các điều kiện chu trình tổ hợp được mô tả ở đây có thể được vận hành với chế độ trong đó độ chọn lọc (như được định nghĩa là UA / UB ; trong đó $UA > UB$) là lớn hơn khoảng 5, là lớn hơn khoảng 10, lớn hơn khoảng 50, hoặc thậm chí lớn hơn khoảng 100, và A là CO_2 và B là metan hoặc các hydrocarbon trọng lượng phân tử cao hơn.

Phân tách bằng màng

Trong một số khía cạnh, zeolit ITQ-55 có thể được sử dụng như một phần của màng. Ví dụ về màng có thể là lớp gồm lớp vô cơ được đỡ bao gồm các hạt liên tiếp của sàng phân tử tinh thể. Ví dụ khác của màng có thể là lớp tự đỡ của các hạt tinh thể zeolit. Các hạt có kích thước hạt trung bình trong khoảng từ 20nm đến 1 μ m. Trong một dạng khía cạnh, kích thước hạt trung bình có thể tùy ý nằm trong khoảng từ 20 đến 500nm, tốt hơn là nằm trong khoảng từ 20 đến 300nm và tốt nhất là nằm trong khoảng từ 20 đến 200nm. Theo cách thay thế, kích thước hạt trung bình như vậy một cách thuận lợi có thể ít hơn 5% ô đơn vị của tinh thể là tại bề mặt tinh thể. Tùy ý, các hạt có kích thước hạt trung bình trong khoảng từ 20nm đến 200nm.

Trong khía cạnh này, lớp có thể bao gồm các hạt sàng phân tử tùy ý được phủ với lớp vỏ vật liệu khác; chúng có thể đồng nhất được như các hạt riêng lẻ (mặc dù chúng có thể cùng phát triển như được mô tả dưới đây) nhờ kính hiển vi điện tử. Lớp, ít nhất sau khi hoạt hóa, dính kết và rắn chắc về mặt cơ học. Trong các khe hở giữa các hạt trong lớp rắn chắc, có thể tồn tại các lỗ rỗng sàng không phân tử dư thừa, mà có thể mở, mở một phần, để cho phép vật liệu đi qua hoặc đi trong màng, hoặc có thể được bịt kín hoàn toàn, cho phép đi qua lớp chỉ qua các lỗ rỗng trong các hạt. Một cách thuận lợi, sự phân phối kích thước hạt như vậy mà 95% các hạt có kích thước trong khoảng $\pm 33\%$ của giá trị trung bình, tốt hơn là 95% là nằm trong khoảng $\pm 15\%$ của giá trị trung bình, tốt hơn là $+ 10\%$ của giá trị trung bình và tốt nhất là 95% các hạt có kích thước trong khoảng $\pm 7.5\%$ của giá trị trung bình.

Cần hiểu rằng kích thước hạt của vật liệu sàng phân tử tạo thành lớp có thể biến thiên liên tục hoặc theo kiểu bậc thang về khoảng cách từ giá đỡ. Trong trường hợp như vậy, yêu cầu tính đồng đều được đáp ứng nếu sự phân phối kích thước hạt là trong giới hạn xác định tại một khoảng cách đã cho từ giá đỡ, mặc dù sự phân phối kích thước hạt một cách thuận lợi sẽ nằm trong giới hạn xác định tại mỗi khoảng cách đã cho từ giá đỡ. Việc sử dụng các tinh thể sàng phân tử của kích thước hạt nhỏ và tốt hơn là của sự phân bố kích thước hạt đồng nhất tạo thuận lợi cho việc sản xuất cấu trúc ba chiều mỏng mà có thể nếu mong muốn nhưng độ dày vẫn được kiểm soát.

Trong một số khía cạnh, các hạt ITQ-55 có thể là liên tiếp, cụ thể là về cơ bản mỗi hạt tiếp xúc với một hoặc nhiều hạt lân cận của nó như thấy rõ khi soi bằng kính hiển vi điện tử, tốt hơn là kính hiển vi có độ phân giải cao, mặc dù không cần thiết tiếp xúc với tất cả các hạt lân cận gần nhất của nó. Tiếp xúc như vậy có thể là trong một số phương án mà các hạt tinh thể lân cận cùng được phát triển, miễn là chúng giữ lại sự đồng nhất của chúng như các hạt tinh thể riêng lẻ. Một cách thuận lợi, cấu trúc ba chiều thu được được đỡ bởi hạt, thay vì được đỡ bởi ma trận, trong các phương án mà lớp về bản chất không chứa các hạt sàng phân tử tinh thể. Trong phương án ưu tiên, các hạt trong lớp được bó chặt.

Lớp mà được xây dựng tùy ý để bao gồm các cách đi giữa các hạt mà cung cấp cấu trúc lỗ rỗng sàng phi phân tử để đi qua hoặc đi vào trong các lớp. Lớp như vậy có thể về bản chất bao gồm các hạt hoặc có thể chứa thành phần khác, mà có thể là lỏng lẻo được gọi là ma trận mà, trong khi bao quanh các hạt, không quá hoàn thiện hoặc khít sao cho tất cả các đường đi quanh các hạt được đóng. Ngoài ra, lớp có thể được xây dựng sao cho có mặt ma trận đóng hoàn toàn những đường đi như vậy, với kết quả mà chỉ đường đi qua hoặc vào trong lớp là tự chúng đi qua các hạt. Sẽ được hiểu là ở đây nói đến giá đỡ của lớp gồm các giá đỡ liên tục và không liên tục.

Đề cập đến kích thước hạt xuyên suốt bản mô tả này là chiều dài nhất của hạt và các kích thước hạt được đo bằng cách tạo ảnh trực tiếp bằng kính hiển vi điện tử. Sự phân phối kích thước hạt có thể được xác định bằng sự kiểm tra việc quét hoặc truyền hình ảnh hiển vi điện tử ưu tiên là trên ảnh lưới, và phân tích mật độ có kích thước thích hợp của các hạt cho kích thước hạt.

Lớp được đỡ theo sáng chế có thể được sản xuất theo một số cách khác nhau. Một chọn lọc có thể làm ra lớp bằng việc kết tủa trên giá đỡ từ huyền phù zeolit dạng keo có thể thu được bằng việc điều chế hỗn hợp tổng hợp chứa nước bao gồm gốc silic oxit và chất định hướng cấu trúc hữu cơ với tỉ lệ đủ để về cơ bản hòa tan hoàn toàn một cách hiệu quả gốc silic oxit trong hỗn hợp tại nhiệt độ sôi của hỗn hợp, và kết tinh từ hỗn hợp tổng hợp. Ngoài ra, hỗn hợp tổng hợp sẽ chứa gốc của thành phần hoặc các thành phần khác, nếu có, trong zeolit. Trong các khía cạnh khác, một hoặc nhiều kỹ thuật được mô tả ở trên để tạo thành cấu trúc chất hấp phụ cũng có thể là phù hợp cho việc tạo thành cấu trúc màng.

Độ dày của lớp sàng phân tử có thể, ví dụ, nằm trong khoảng từ 0,1 đến 20 μm , hoặc 0,1 đến 15 μm , hoặc từ 0,1 đến 2 μm . Một cách có lợi, độ dày của lớp và kích thước hạt của sàng phân tử là sao cho độ dày lớp ít nhất gấp đôi kích thước hạt, dẫn đến lớp nhiều hạt dày hơn một lớp hạt. Ngoài ra, lớp về cơ bản không chứa các lỗ nhỏ, cụ thể là, về cơ bản không chứa lỗ hổng có kích thước lớn nhất lớn hơn 0,1 μm . Ngoài ra, nhiều nhất 0,1% và tốt hơn là nhiều nhất 0,0001% diện tích bề mặt bị chiếm bởi các lỗ hổng như vậy.

Giá đỡ lớp có thể là không có lỗ rỗng hoặc, tốt hơn là có lỗ rỗng, và có thể là liên tục hoặc dạng hạt. Các ví dụ về các giá đỡ không có lỗ rỗng, có thể được đề cập đến như thủy tinh, thạch anh nóng chảy, và silic oxit, silic, gốm đặc, ví dụ, đất sét, và các kim loại. Các ví dụ về các giá đỡ có lỗ rỗng, có thể được đề cập đến như thủy tinh có lỗ rỗng, carbon có lỗ rỗng, gốm có lỗ rỗng, các kim loại có lỗ rỗng được nung kết, ví dụ thép hoặc niken (mà có kích thước lỗ thường nằm trong khoảng 0,2 đến 15 μm), và, đặc biệt là, oxit vô cơ, ví dụ nhôm oxit anpha, titan oxit, hỗn hợp nhôm oxit/zircon oxit, hoặc cordierit. Tại bề mặt tiếp xúc với lớp, giá đỡ có thể có các lỗ có kích thước lên đến 50 lần độ dày lớp, nhưng tốt hơn là kích thước lỗ có thể so sánh với độ dày lớp.

Tùy chọn khác nữa để tạo thành lớp màng có thể là để có lớp màng lai hoặc lớp màng hỗn hợp. Ví dụ về lớp màng lai có thể là các hạt zeolit ITQ-55 được trộn với (các) polyme và được kéo sợi như các sợi rỗng. Một cách tùy ý, các sợi này có thể được chuyển hóa do nhiệt thành các vật liệu có chứa carbon để tạo thành lớp bao gồm ITQ-55 và các sợi hỗn hợp carbon. Ví dụ, các màng sợi rỗng có thể được sản xuất qua

quy trình kéo sợi rỗng. Một hoặc nhiều dung dịch polyme có thể được đúc ép với lỗ chất lưu qua khuôn kéo sợi hình khuyên vào trong bể làm nguội chứa nước. Một cách tùy chọn, hai hoặc nhiều dung dịch polyme có thể cùng được đúc ép để tạo thành sợi hỗn hợp. Ít nhất một dung dịch polyme cũng có thể bao gồm các hạt tinh thể ITQ-55, để ITQ-55 được hợp nhất thành cấu trúc sợi rỗng. Khi sợi mới hình thành đi vào bể làm nguội chứa nước, các dung môi khuếch tán từ các sợi vào trong bể làm nguội trong khi nước từ bể làm nguội khuếch tán vào trong các sợi, làm cho sự phân tách pha xảy ra. Các cấu trúc lỗ mở có thể được tạo thành trong suốt quy trình phân tách pha này. Quy trình tiêu chuẩn tiếp theo đơn giản để điều chế các môđun sợi rỗng, như được biết đến trong công nghiệp, sau đó có thể được sử dụng.

Đối với nhiều mục đích sử dụng một cách có lợi, lớp có thể về cơ bản bao gồm vật liệu sàng phân tử, hoặc có thể là vật liệu hỗn hợp của vật liệu sàng phân tử và vật liệu bổ sung thêm, mà cũng là vô cơ. Vật liệu bổ sung thêm có thể là vật liệu của giá đỡ. Nếu lớp là vật liệu hỗn hợp thì có thể, như được biểu thị ở trên, chứa các lỗ rỗng lớn/hoặc các lỗ rỗng li ti, bị giới hạn bởi các phần sàng phân tử, bởi các phần vật liệu bổ sung thêm, hoặc bởi cả sàng phân tử và vật liệu bổ sung thêm. Vật liệu có thể được áp dụng cho giá đỡ đồng thời hoặc sau khi kết tủa của sàng phân tử, và có thể được áp dụng, ví dụ, bằng quy trình sol-gel được theo dõi bởi sự lưu hóa bằng nhiệt. Các vật liệu thích hợp bao gồm, ví dụ, các oxit vô cơ, ví dụ, silic oxit, nhôm oxit, và titan oxit. Các vật liệu bổ sung thêm có mặt một cách có lợi với tỷ lệ đủ thấp của toàn bộ vật liệu của lớp mà các tinh thể sàng phân tử còn lại liên tiếp.

Trong ví dụ khác về quy trình sản xuất lớp bao gồm sàng phân tử kết tinh trên giá đỡ có lỗ rỗng, lớp có thể được tạo thành bằng các bước tiền xử lý giá đỡ có lỗ rỗng để tạo thành tại bề mặt của chúng một lớp chắn, và đặt vào giá đỡ hỗn hợp phản ứng bao gồm huyền phù dạng keo của các tinh thể sàng phân tử, có kích thước hạt trung bình lớn nhất là 100nm và một cách có lợi, phân bố kích thước hạt sao cho ít nhất 95% số hạt có kích thước nằm trong khoảng $\pm 15\%$, tốt hơn là $\pm 10\%$, tốt hơn nữa là nằm trong khoảng $\pm 7,5\%$ của kích thước trung bình, silic oxit dạng keo và chất định hướng cấu trúc hữu cơ tùy chọn, để tạo thành lớp sàng phân tử được đỡ, và nếu mong muốn hoặc yêu cầu, hoạt hóa lớp thu được. Việc hoạt hóa loại bỏ các tấm khuôn và có thể đạt được bằng việc nung khô, xử lý bằng ozon, xử lý bằng plasma hoặc sự chiết hóa

học như sự chiết bằng axit. Sáng chế cũng đề xuất lớp được đỡ được tạo ra bởi quy trình.

Lớp chắn có chức năng ngăn ngừa nước trong hỗn hợp phản ứng chứa nước khỏi việc đi vào các lỗ của giá đỡ theo cách ưu tiên đến một khoảng rộng sao cho các hạt silic oxit và zeolit tạo thành lớp gel dày trên giá đỡ. Lớp chắn có thể là tạm thời hoặc cố định. Lớp chắn tạm thời, có thể được đề cập đến chất lưu thấm mà có thể được giữ lại trong các lỗ trong suốt quá trình ứng dụng của hỗn hợp phản ứng, và sẵn sàng loại bỏ sau ứng dụng này và quá trình xử lý tiếp theo.

Phủ quay có thể vẫn là kỹ thuật có lợi ích khác để đưa hỗn hợp phản ứng vào giá đỡ theo khía cạnh này và khía cạnh khác nữa của sáng chế. Chất lưu thấm theo đó nên là một chất mà sẽ còn lại trong các lỗ trong suốt quá trình quay nếu kỹ thuật phủ quay được sử dụng; theo đó tốc độ quay, kích thước lỗ, và các đặc tính vật lý của chất lưu cần được tính đến trong việc chọn lọc chất lưu. Chất lưu cũng nên tương thích với hỗn hợp phản ứng, ví dụ nếu hỗn hợp phản ứng phân cực thì chất lưu chắn cũng nên phân cực. Vì hỗn hợp phản ứng thuận lợi là hỗn hợp phản ứng chứa nước, nên nước được sử dụng một cách thuận lợi như lớp chắn. Để cải thiện sự thấm qua, lớp chắn chất lưu có thể được sử dụng ở áp suất giảm hoặc nhiệt độ tăng. Nếu phủ quay được sử dụng, giá đỡ được xử lý với lớp chắn chất lưu được quay một cách có lợi trong một thời gian và tại tốc độ mà sẽ loại bỏ chất lưu dư trên bề mặt, mà không loại bỏ chất lưu khỏi các lỗ. Sự hóa hơi sớm của chất lưu từ các lỗ ngoài cùng trong suốt quá trình xử lý có thể được ngăn ngừa bằng cách cung cấp không khí bão hòa bằng hơi chất lỏng.

Trong suốt quá trình phủ quay, độ nhót của hỗn hợp phản ứng và tốc độ quay có thể điều chỉnh được độ dày phủ. Hỗn hợp được tiếp xúc đầu tiên một cách có lợi với giá đỡ ổn định, sau đó sau thời gian tiếp xúc ngắn, giá đỡ được quay ở tốc độ mong muốn. Sau khi quay, silic oxit được già hóa một cách có lợi bằng cách giữ lớp được đỡ trong môi trường ẩm cao, và sau đó được sấy khô, đầu tiên, một cách có lợi tại nhiệt độ phòng và sau đó là trong lò sấy.

Như tùy chọn khác nữa, cung cấp quy trình để sản xuất lớp bao gồm sàng phân tử tinh thể trên giá đỡ có lỗ rỗng mà bao gồm việc đưa vào giá đỡ bằng cách phủ những huyền phù dạng keo của các tinh thể sàng phân tử, có kích thước hạt trung bình lớn nhất là 100nm và phân bố kích thước hạt một cách có lợi sao cho ít nhất là 95%

hạt có kích thước nằm trong khoảng $\pm 15\%$, tốt hơn là $\pm 10\%$, tốt hơn nữa là $\pm 7,5\%$ so với kích thước hạt trung bình, sấy khô gel thu được trên giá đỡ và hoạt hóa lớp thu được nếu muốn hoặc được yêu cầu. Chọn lọc khác nữa có thể bao gồm tổng hợp các tinh thể sàng phân tử tại chỗ trên giá đỡ.

Các ứng dụng lưu trữ

Trong các khía cạnh khác nhau, cấu trúc chất hấp phụ như được mô tả ở trên cũng được sử dụng cho việc lưu trữ các chất lưu. Quá trình hấp phụ ban đầu chất lưu hoặc thành phần chất lưu vào trong cấu trúc chất hấp phụ có thể được thực hiện theo cách thuận tiện bất kỳ, như theo quy trình hấp phụ được mô tả ở trên. Một cách tùy ý, quá trình hấp phụ các chất lưu để lưu trữ có thể được thực hiện sử dụng khí đầu vào về cơ bản chứa thành phần đơn lẻ, là trái với việc thực hiện sự phân tách khác trong suốt quá trình hấp phụ.

Trong một số khía cạnh, sau khi chất lưu được hấp phụ trong cấu trúc chất hấp phụ, cấu trúc chất hấp phụ có thể được giữ ở nhiệt độ và/hoặc áp suất giống với các điều kiện được sử dụng trong suốt quá trình hấp phụ. Theo các khía cạnh khác, ít nhất một trong số nhiệt độ và/hoặc áp suất có thể được thay đổi để giúp giữ chất lưu trong cấu trúc chất hấp phụ. Ví dụ, sau khi hấp phụ chất lưu tại nhiệt độ thứ nhất, nhiệt độ của cấu trúc chất hấp phụ có thể được giảm để giúp giữ chất lưu trong cấu trúc chất hấp phụ.

Các điều kiện để giữ chất lưu được hấp phụ trong cấu trúc chất hấp phụ có thể phụ thuộc một phần vào bản chất của thành phần được hấp phụ. Ví dụ, hydro có thể được hấp phụ dễ dàng bởi ITQ-55, nhưng hydro cũng có thể có khả năng giải hấp phụ khỏi ITQ-55 tại khoảng nhiệt độ rộng. Để giữ lượng hydro được lưu trữ mong muốn trong cấu trúc chất hấp phụ, áp suất bên ngoài của hydro có thể được cần đến, để hydro bên ngoài cấu trúc chất hấp phụ cân bằng với hydro bên trong cấu trúc chất hấp phụ. Trường hợp này có thể ngược lại với lưu trữ metan, etylen, metanol, etan, hoặc hydrocarbon/hợp chất hữu cơ khác trong cấu trúc chất hấp phụ. Các hydrocarbon và các hợp chất hữu cơ có thể có khả năng bị giới hạn để đi vào trong và/hoặc khuếch tán trong cấu trúc lỗ của ITQ-55 tại nhiệt độ và/hoặc áp suất thấp. Kết quả là, lượng hydrocarbon và/hoặc hợp chất hữu cơ có thể được lưu trữ trong cấu trúc chất hấp phụ

dựa trên ITQ-55 mà không có lượng cân bằng tương ứng của thành phần được lưu trữ bên ngoài cấu trúc chất hấp phụ.

Trong suốt bước hấp phụ ban đầu, thành phần chất lưu có thể được hấp phụ vào trong cấu trúc chất hấp phụ. Các điều kiện trong suốt quá trình hấp phụ có thể bao gồm, ví dụ, a) nhiệt độ ít nhất là khoảng 325K (51,85°C), hoặc ít nhất là khoảng 375K (101,85°C), hoặc ít nhất là khoảng 425K (151,85°C), hoặc ít nhất là khoảng 475K (201,85°C; b) áp suất ít nhất là khoảng 100bar (10MPa), hoặc ít nhất là khoảng 300bar (30MPa), hoặc ít nhất là khoảng 500bar (50MPa), hoặc ít nhất là khoảng 700bar (70MPa); hoặc c) tổ hợp của chúng. Không bị ràng buộc bởi bất kỳ lý thuyết cụ thể nào, nhiệt độ và/hoặc áp suất được nâng lên có thể cho phép đưa tải được nâng lên của thành phần hữu cơ vào trong cấu trúc chất hấp phụ.

Sau khi tải cấu trúc chất hấp phụ, nhiệt độ và/hoặc áp suất có thể giảm. Trong một số khía cạnh, trong đó tải của cấu trúc chất hấp phụ được thực hiện tại áp suất được nâng lên, áp suất có thể giảm đến thấp hơn hoặc bằng khoảng 100bar (10MPa), hoặc thấp hơn hoặc bằng khoảng 10bar (1MPa), hoặc thấp hơn hoặc bằng khoảng 2bar (0,2MPa), hoặc thấp hơn hoặc bằng khoảng 1bar (0,1MPa). Trong các khía cạnh trong đó tải của cấu trúc chất hấp phụ được thực hiện ở nhiệt độ được nâng lên, nhiệt độ có thể giảm đến thấp hơn hoặc bằng khoảng 325K (51,85°C), thấp hơn hoặc bằng khoảng 300K (26,85 °C), thấp hơn hoặc bằng khoảng 275K (1,85 °C), hoặc thấp hơn hoặc bằng khoảng 250K (-23,15°C), hoặc thấp hơn hoặc bằng khoảng 225K (-48,15°C), hoặc thấp hơn hoặc bằng khoảng 200K (-73,15°C). Trong các khía cạnh trong đó nhiệt độ và áp suất được nâng cao trong suốt quá trình tải, nhiệt độ có thể được giảm một cách tùy ý đầu tiên và sau đó áp suất có thể được giảm. Sau khi giảm nhiệt độ và/hoặc áp suất, một số quá trình giải hấp phụ của các thành phần được hấp phụ có thể xảy ra. Tuy nhiên, dựa trên các điều kiện nhiệt độ và/hoặc áp suất giảm, một phần của thành phần có thể bị kẹt lại theo động học giữ lại trong cấu trúc chất hấp phụ. Điều này có thể cho phép cấu trúc chất hấp phụ giữ lại một lượng thành phần chất lưu bên trong cấu trúc chất hấp phụ, thậm chí môi trường bên ngoài của chất hấp phụ có thể không chứa lâu hơn thành phần được hấp phụ. Lượng tải được giữ lại trong chất hấp phụ có thể tương ứng với phần trăm lượng tải mà đạt được trong suốt quá trình hấp phụ, chẳng hạn như ít nhất là khoảng 10% trọng lượng của lượng tải trong suốt quá trình

hấp phụ, hoặc ít nhất là khoảng 20% trọng lượng, hoặc ít nhất là khoảng 30% trọng lượng, hoặc ít nhất là khoảng 40% trọng lượng, hoặc ít nhất là khoảng 50%, hoặc ít nhất là khoảng 60% trọng lượng. Cấu trúc chất hấp phụ sau đó có thể được vận chuyển tùy ý dưới các điều kiện nhiệt độ và/hoặc áp suất giảm.

Sau khi lưu trữ một lượng thời gian mong muốn, nhiệt độ có thể tăng để cho phép thành phần được hấp phụ đi ra khỏi cấu trúc chất hấp phụ. Điều này cho phép thành phần được hấp phụ, tương ứng với nhiên liệu và/hoặc chất phản ứng tiềm năng, để được lưu trữ và vận chuyển tùy ý dưới các điều kiện ít khắc nghiệt. Nói cách khác, nhiệt độ và/hoặc áp suất yêu cầu cho việc lưu trữ thành phần được hấp phụ trong cấu trúc chất hấp phụ có thể giảm tương ứng với các điều kiện được yêu cầu để lưu trữ thành phần được hấp phụ trong sự vắng mặt của cấu trúc chất hấp phụ. Lượng thời gian lưu trữ có thể là lượng thời gian thuận tiện bất kỳ, chẳng hạn như ít nhất một ngày, ít nhất một tháng, và lên đến một năm hoặc nhiều hơn.

Quy trình xúc tác và phương pháp sử dụng

Ngoài phân tách, zeolit ITQ-55 cũng có thể phù hợp để sử dụng như chất xúc tác cho các phản ứng khác nhau. Theo một số khía cạnh, ITQ-55 có thể phù hợp cho các phản ứng mà thường có thể được xúc tác bởi các zeolit có vòng 8 cạnh như kích thước vòng lớn nhất. Ví dụ, việc giảm xúc tác chọn lọc của nitơ oxit, một cách tùy ý trong sự có mặt của amoniac, là phản ứng mà có thể được xúc tác bằng các zeolit vòng 8 cạnh.

Các ví dụ của việc sử dụng chất xúc tác phù hợp của zeolit ITQ-55 bao gồm một cách tiềm năng, nhưng không giới hạn, (a) quá trình cracking bằng hydro của các nguồn nguyên liệu cấp dư dầu mỏ nặng, các nguồn nguyên liệu theo chu kỳ và các nguồn nguyên liệu cấp cracking bằng hydro khác, thường có mặt của thành phần hydrat hóa được chọn lọc từ các nhóm 6 và 8 đến 10 của bảng tuần hoàn các nguyên tố; (b) phân tách parafin, bao gồm sự phân tách parafin đồng phân hóa, để loại bỏ có chọn lọc các parafin mạch thẳng ra khỏi các nguồn nguyên liệu cấp hydrocarbon thường sôi trên 177°C, bao gồm các sản phẩm tinh chế và các nguồn nguyên liệu gốc dầu bôi trơn; (c) quá trình cracking có xúc tác của các nguyên liệu cấp hydrocarbon, như napta, gazoin và dầu dư, thường có mặt chất xúc tác cracking có lỗ lớn, như zeolit Y; (d) quá trình polyme hóa ở mức thấp của các olefin mạch thẳng và phân nhánh có từ khoảng từ 2

đến 21, tốt hơn là 2 đến 5 nguyên tử carbon, để sản xuất các olefin từ trung bình đến nặng mà hữu ích cho cả hai nhiên liệu, tức là, xăng hoặc nguồn nguyên liệu trộn xăng, và các hóa chất; (e) đồng phân hóa các olefin, cụ thể là các olefin có từ 4 đến 6 nguyên tử carbon, và đặc biệt là butylen tiêu chuẩn để sản xuất các iso-olefin; (f) làm giàu các ankan thấp hơn, như metan, đến các hydrocarbon cao hơn, như etylen và benzen; (g) khử tỷ lệ các hydrocarbon alkylaromatic, như toluen, để sản xuất các hydrocarbon dialkylaromatic, như các xylen; (h) alkyl hóa các hydrocarbon thơm, như benzen, với các olefin, như etylen và propylen, để sản xuất etylbenzen và cumen; (i) đồng phân hóa các hydrocarbon dialkylaromatic, chẳng hạn như các xylen, (j) giảm xúc tác của các oxit nitơ, (k) tổng hợp các monoalkylamin và các dialkylamine, (l) chuyển hóa metanol thành dimetyl ete, (m) chuyển hóa metanol (và/hoặc các chất oxy hóa khác) thành các olefin, và (n) chuyển hóa metanol (và/hoặc các chất oxy hóa khác) thành các chất thơm.

Đối với ít nhất một số trong số loại phản ứng nêu trên, sự xúc tác hiệu quả của phản ứng bởi zeolit ITQ-55 có thể bao gồm ít nhất là lối vào riêng của một hoặc nhiều chất phản ứng vào trong cấu trúc lỗ của zeolit. Cấu trúc lỗ của zeolit ITQ-55 bao gồm các đường dẫn vòng 8 cạnh. Các đường dẫn vòng 8 cạnh bao gồm kích thước đường dẫn dạng lỗ tối thiểu trong mạng lưới lỗ là 5,9 Ångstrom x 2,1 Ångstrom ở nhiệt độ môi trường. Kích thước đường dẫn dạng lỗ tối thiểu này có thể giới hạn các loại hợp chất mà có thể đi vào và/hoặc đi qua mạng lưới lỗ hiệu quả. Tuy nhiên, vòng 8 cạnh cung cấp kích thước tối thiểu cũng được cho rằng có tính mềm dẻo. Tính mềm dẻo có thể cho phép vòng 8 cạnh biến dạng, chẳng hạn như do các dao động nhiệt và/hoặc do các dao động gây ra bởi áp suất tăng, có thể dẫn đến sự tăng tạm thời một cách tiềm năng kích thước của đường dẫn dạng lỗ. Không bị ràng buộc bởi bất kỳ lý thuyết cụ thể nào, người ta tin rằng tính mềm dẻo của vòng 8 cạnh xác định kích thước của đường dẫn dạng lỗ có thể cho phép điều chỉnh bổ sung sự xúc tác của các phản ứng khác nhau dựa trên nhiệt độ và/hoặc áp suất.

Ngoài ra hoặc theo cách khác, kích thước hạt của các tinh thể ITQ-55 được sử dụng trong cấu trúc chất hấp phụ hoặc cấu trúc màng có thể có tác động lên khả năng của cấu trúc chất hấp phụ hoặc cấu trúc màng để thực hiện xúc tác. Như một ví dụ, kích thước hạt của các tinh thể ITQ-55 có thể có ảnh hưởng lên lượng "không gian

chết" mà có mặt ở bề mặt và/hoặc bên trong phía trong cấu trúc chất hấp phụ hoặc cấu trúc màng. Về mặt toán học, tỷ trọng nén chặt của tập hợp các khối cầu rắn có cùng kích thước phụ thuộc vào bán kính của các khối cầu. Đối với tập hợp các khối cầu rắn, bán kính trung bình càng lớn, kích thước của khoảng trống hoặc khe hở giữa các quả cầu rắn càng lớn. Không bị ràng buộc bởi bất kỳ lý thuyết cụ thể nào, người ta tin rằng với tập hợp các tinh thể ITQ-55 có cùng kích thước, kích thước của các chỗ trống hoặc các không gian chết được tạo ra sau khi nén chặt các tinh thể có thể liên quan đến kích thước hạt trung bình. Kích thước hạt nhỏ hơn có thể làm giảm không gian chết này, do đó cung cấp diện tích bề mặt lỗ tăng để nhận các thành phần chất lưu cho quá trình xúc tác.

Ngoài ra hoặc theo cách khác, thành phần của các tinh thể ITQ-55 được sử dụng có thể có tác động lên các đặc tính xúc tác của chất xúc tác. Trong một số khía cạnh, ITQ-55 có thể được tổng hợp để có cấu trúc khung bao gồm chủ yếu là silic oxit và oxy. Trong khía cạnh khác, một phần của các nguyên tử khung trong cấu trúc ITQ-55 có thể được thay thế bởi các nguyên tố khác. Ví dụ, một phần silic oxit trong cấu trúc khung có thể được thay thế bởi các nguyên tử từ nhóm khác trong bảng tuần hoàn, như Al, P, và/hoặc B. Trong một khía cạnh, một phần silic oxit trong cấu trúc khung có thể được thay thế bởi Al. Như ví dụ khác, một phần silic oxit trong khung có thể được thay thế bởi các nguyên tử từ hàng khác trong bảng tuần hoàn, như Ge hoặc P. Các thay đổi về thành phần như vậy có thể làm thay đổi kích thước của các lỗ trong cấu trúc tinh thể và/hoặc làm thay đổi ái lực của ITQ-55 tương ứng với một hoặc nhiều chất phản ứng tiềm năng, mà có thể ảnh hưởng đến khả năng xúc tác phản ứng. Ngoài ra hoặc theo cách khác, các thay đổi về thành phần như vậy cũng có thể biến đổi các đặc tính của các tinh thể ITQ-55, như tính axit của các tinh thể, mà cũng có thể ảnh hưởng đến hoạt tính xúc tác.

Khi được sử dụng như chất xúc tác, các tinh thể ITQ-55 có thể được tích hợp vào trong chất xúc tác bằng bất kỳ phương pháp thích hợp nào. Trong một số khía cạnh, các hạt chất xúc tác được đúc ép có thể là dạng chất xúc tác thích hợp. Các hạt chất xúc tác được đúc ép có thể bao gồm các tinh thể zeolit cũng như chất kết dính tùy chọn. Một cách tùy chọn, các kim loại xúc tác có thể được bổ sung vào các hạt xúc tác như vậy, chẳng hạn như bằng cách thấm. Đối với các hạt xúc tác mà bao gồm chất kết

dính tùy chọn, chất kết dính tùy chọn có thể có mặt với lượng phù hợp bất kỳ, như từ khoảng 10% trọng lượng đến khoảng 90% trọng lượng, tiêu biểu hơn là từ khoảng 30% trọng lượng đến khoảng 70% trọng lượng. Các chất kết dính phù hợp có thể bao gồm, nhưng không giới hạn, các oxit kim loại như silic oxit, nhôm oxit, silic oxit-nhôm oxit, ziricon oxit, titan oxit, và các tổ hợp của chúng. Các kim loại xúc tác phù hợp có thể bao gồm, nhưng không được giới hạn, các kim loại chuyển tiếp. Các ví dụ về các kim loại chuyển tiếp phù hợp bao gồm các kim loại Nhóm VI (Mo, W), các kim loại Nhóm VIII (Co, Ni, Pt, Pd, Fe, Ir), và các tổ hợp của chúng. Các kim loại xúc tác này có thể có mặt với lượng nằm trong khoảng 0,1% trọng lượng đến khoảng 40% trọng lượng tương ứng với trọng lượng của các hạt xúc tác. Ngoài ra hoặc theo các khác, trong một số khía cạnh, các hạt xúc tác (ví dụ, các hạt xúc tác được đỡ) mà bao gồm các tinh thể ITQ-55 có thể còn bao gồm một hoặc nhiều zeolit bổ sung, như các sàng phân tử có cấu trúc khung MFI (ví dụ, ZSM-5), cấu trúc khung FAU (ví dụ, zeolit Y), hoặc sàng phân tử dựa trên cấu trúc khung phù hợp khác.

Trong khía cạnh khác, đá nguyên khối hoặc cấu trúc lớn khác chứa và/hoặc bao gồm các tinh thể zeolit có thể được sử dụng. Ví dụ, bất kỳ trong số cấu trúc chất hấp phụ và/hoặc màng được mô tả ở trên có thể phù hợp để sử dụng trong một số ứng dụng xúc tác. Một cách tùy ý, các cấu trúc này cũng có thể bao gồm các kim loại xúc tác khác, chẳng hạn như các kim loại xúc tác khác được thấm trên bề mặt của cấu trúc.

Như các ví dụ cụ thể, zeolit ITQ-55 có thể hữu ích trong chuyển hóa xúc tác các chất bị oxy hóa thành một hoặc nhiều olefin, cụ thể là etylen và propylen. Như được sử dụng ở đây, thuật ngữ "các chất bị oxy hóa" được xác định để bao gồm, nhưng không nhất thiết bị giới hạn ở các rượu béo, các ete, các hợp chất carbonyl (các andehyt, xeton, axit carboxylic, carbonat, và các chất tương tự) và cũng như các hợp chất chứa các nguyên tử khác loại, chẳng hạn như các halogenua, mercaptan, sulfua, amin, và hỗn hợp của chúng. Phần nhóm chức béo sẽ thường chứa từ khoảng 1 đến khoảng 10 nguyên tử carbon, như từ khoảng 1 đến khoảng 4 nguyên tử carbon.

Các chất oxy hóa đại diện bao gồm rượu mạch thẳng bậc thấp hơn hoặc rượu béo phân nhánh, các phân đôi không bão hòa của chúng, và các chất tương tự nitơ, halogen, và lưu huỳnh. Các ví dụ về các hợp chất oxy hóa phù hợp bao gồm metanol; etanol; n-propanol; isopropanol; các rượu từ C4 đến C10; metyl etyl ete; dimetyl ete;

diethyl ete; di-isopropyl ete; metyl mercaptan; metyl sulfua; metyl amin; etyl mercaptan; di-etyl sulfua; di-etyl amin; etyl clorua; formaldehyt; di-metyl carbonat; di-metyl xeton; axit axetic; các n-alkyl amin, các n-alkyl halogen, các n-alkyl sulfua có các nhóm n-alkyl của hợp chất nằm trong khoảng từ khoảng 3 đến 10 nguyên tử carbon, và hỗn hợp của chúng. Các hợp chất bị oxy hóa phù hợp cụ thể là metanol, dimetyl ete, hoặc hỗn hợp của chúng, tốt nhất là metanol. Như được sử dụng ở đây, thuật ngữ "bị oxy hóa" chỉ biểu thị vật liệu hữu cơ được sử dụng như nguồn cấp. Tổng tải nạp của nguồn cấp đến vùng phản ứng có thể chứa các hợp chất bổ sung, như các chất pha loãng.

Trong quy trình chuyển hóa chất bị oxy hóa, nguyên liệu cấp bao gồm chất bị oxy hóa hữu cơ, một cách tùy chọn, với một hoặc nhiều chất pha loãng, được tiếp xúc trong pha hơi trong vùng phản ứng với chất xúc tác bao gồm sàng phân tử theo sáng chế ở các điều kiện xử lý hiệu quả để sản xuất các olefin mong muốn. Một cách tùy ý, quy trình có thể được thực hiện trong pha lỏng hoặc pha hơi/lỏng hỗn hợp. Khi quy trình được thực hiện trong pha lỏng hoặc pha hơi/lỏng hỗn hợp, tốc độ chuyển hóa và độ chọn lọc khác của nguồn cấp nguyên liệu thành sản phẩm có thể thu được phụ thuộc vào chất xúc tác và các điều kiện phản ứng.

Nên lưu ý rằng cả metanol và dimetyl ete có thể có đường kính động lực mà ít nhất là giống với metan. Ở nhiệt độ gần 25°C và áp suất gần 0,1MPa, metanol và/hoặc dimetyl ete có thể có khả năng bị giới hạn để đi vào cấu trúc lỗ của zeolit ITQ-55. Tuy nhiên, vì nhiệt độ và/hoặc áp suất tăng, metanol và dimetyl ete có thể có khả năng đi vào cấu trúc lỗ của ITQ-55 tăng lên, do đó cho phép tăng khả năng xúc tác phản ứng chất bị oxy hóa thành olefin. Sự tăng nhiệt độ và/hoặc áp suất thêm nữa có thể cho phép sự chuyển hóa các chất bị oxy hóa khác, như etanol. Kết quả là, sự thay đổi nhiệt độ và/hoặc áp suất trong suốt quá trình chuyển hóa chất bị oxy hóa thành olefin có thể cho phép điều chỉnh phản ứng chuyển hóa.

Như ví dụ, việc tải ban đầu của metanol hoặc dimetyl ete có thể được đưa vào cấu trúc chất xúc tác và/hoặc các hạt xúc tác bao gồm ITQ-55 tại áp suất thứ nhất. Ở áp suất thứ nhất, áp suất của metanol và/hoặc dimetyl ete có thể đủ để tải cấu trúc chất xúc tác và/hoặc các hạt xúc tác. Sau đó áp suất có thể giảm trong khi duy trì nhiệt độ trong đó metanol và/hoặc dimetyl ete có lượng khuếch tán trong cấu trúc lỗ ITQ-55

giảm hoặc tối thiểu hóa. Điều này có thể dẫn đến chất bị oxy hóa được giữ trong cấu trúc lỗ bị hạn chế mà có thể cho phép sản xuất chọn lọc etylen với năng suất tăng. Một cách tùy ý, metan có thể được sử dụng thay cho metanol và/hoặc dimetyl ete, cùng với chất oxy hóa phù hợp như nước hoặc oxy phân tử.

Khi có mặt, (các) chất pha loãng thường không phản ứng với nguyên liệu cấp hoặc thành phần xúc tác sàng phân tử và thường được sử dụng để giảm nồng độ chất bị oxy hóa trong nguyên liệu cấp. Các ví dụ không giới hạn về chất pha loãng phù hợp bao gồm heli, argon, nitơ, carbon monoxit, carbon dioxit, nước, về cơ bản là các parafin không phản ứng (đặc biệt là các alkan như metan, etan, và propan), về cơ bản là các hợp chất thơm không phản ứng, và hỗn hợp của chúng. Các chất pha loãng được ưu tiên nhất là nước và nitơ, với nước được đặc biệt ưu tiên. (Các) chất pha loãng có thể bao gồm từ khoảng 1% mol đến khoảng 99% mol trong tổng hỗn hợp cấp.

Nhiệt độ được sử dụng trong quy trình chuyển hóa chất bị oxy hóa có thể biến thiên trên khoảng rộng, như từ khoảng 200°C đến khoảng 1000°C, ví dụ, từ khoảng 250°C đến khoảng 800°C, bao gồm từ khoảng 250°C đến khoảng 750°C, thích hợp là từ khoảng 300°C đến khoảng 650°C, tiêu biểu là từ khoảng 350°C đến khoảng 600°C, và cụ thể là từ khoảng 400°C đến khoảng 600°C.

Các sản phẩm olefin nhẹ sẽ tạo ra, dù không nhất thiết là lượng tối ưu, tại khoảng áp suất rộng, bao gồm nhưng không giới hạn đến áp suất tự sinh và áp suất nằm trong khoảng từ khoảng 0,1kPa đến khoảng 10MPa. Một cách phù hợp, áp suất nằm trong khoảng từ khoảng 7kPa đến khoảng 5MPa, như nằm trong khoảng từ khoảng 50kPa đến khoảng 1MPa. Các áp suất đã đề cập ở trên là loại trừ chất pha loãng, nếu bất kỳ chất pha loãng nào có mặt, và việ dẫn đến áp suất riêng phần của nguyên liệu cấp như đề cập đến các hợp chất bị oxy hóa và/hoặc hỗn hợp của chúng. Các giá trị đầu mút của áp suất thấp hơn và cao hơn có thể ảnh hưởng bất lợi đến độ chọn lọc, sự chuyển hóa, tốc độ luyện cốc, và/hoặc tốc độ phản ứng; tuy nhiên, các olefin nhẹ như etylen vẫn có thể tạo ra.

Quy trình có thể được tiếp tục trong khoảng thời gian đủ để sản xuất các sản phẩm olefin mong muốn. Thời gian phản ứng có thể biến thiên từ khoảng phần mười giây đến một vài giờ. Thời gian phản ứng được xác định chủ yếu bởi nhiệt độ phản

ứng, áp suất, chất xúc tác được chọn lọc, vận tốc không gian của trọng lượng theo giờ, pha (lỏng hay hơi) và các đặc tính thiết kế của quy trình được chọn lọc.

Khoảng rộng của tốc độ không gian theo trọng lượng tính theo đơn vị thời gian giờ (weight hourly space velocities - WHSV) đối với nguyên liệu cấp có thể được sử dụng trong quy trình chuyển hóa chất bị oxy hóa. WHSV được xác định là trọng lượng nguồn cấp (ngoại trừ chất pha loãng) trên giờ trên trọng lượng tổng thể tích phản ứng của chất xúc tác sàng phân tử (ngoại trừ các chất trơ hoặc chất độn). WHSV thường nằm trong khoảng từ khoảng 0,01 trên giờ đến khoảng 500 trên giờ, chẳng hạn như nằm trong khoảng từ khoảng 0,5 trên giờ đến khoảng 300 trên giờ, ví dụ nằm trong khoảng từ khoảng 0,1 trên giờ đến khoảng 200 trên giờ.

Phương án thực tế của hệ thống lò phản ứng đối với quy trình chuyển hóa chất bị oxy hóa là lò phản ứng tầng sôi với sự tái sinh liên tục, giống với thiết bị cracking xúc tác tầng sôi điều biến. Các tầng cố định thường không được ưu tiên cho quy trình vì sự chuyển hóa chất bị oxy hóa thành olefin là quy trình tỏa nhiệt cao mà yêu cầu một vài giai đoạn có các bộ phận làm nguội trung gian hoặc các thiết bị làm nguội khác. Phản ứng cũng dẫn đến sự giảm áp suất cao do việc sản xuất khí áp suất thấp, tỷ trọng thấp.

Vì chất xúc tác trong quy trình chất oxy hóa thành olefin này phải được tạo ra thường xuyên, lò phản ứng nên cho phép loại bỏ dễ dàng một phần chất xúc tác vào bộ tái sinh, trong đó chất xúc tác phải trải qua môi trường tái sinh, chẳng hạn như khí bao gồm oxy, ví dụ không khí, để đốt cháy cốc khỏi chất xúc tác mà khôi phục được các hoạt tính xúc tác. Các điều kiện nhiệt độ, áp suất riêng phần của oxy, và thời gian ổn định trong thiết bị tái sinh cần được chọn lọc để đạt được nồng độ cốc trong chất xúc tác được tái sinh ít hơn khoảng 0,5% theo trọng lượng. Ít nhất một phần chất xúc tác được tái sinh cần được quay lại lò phản ứng.

Như ví dụ khác, các chất xúc tác có hiệu quả trong chuyển hóa metanol (và/hoặc các chất bị oxy hóa khác) thành olefin cũng thường có hiệu quả trong chuyển hóa metanol và/hoặc các chất bị oxy hóa khác thành các hợp chất thơm. Các điều kiện phản ứng để tạo thành các chất thơm từ metanol thường giống với các điều kiện phản ứng để tạo thành các olefin, với sự tạo thành các chất thơm thường được ưu tiên bởi các điều kiện có xu hướng hướng về cường độ cao hơn. Do đó, trong một số khía cạnh,

các điều kiện mà có thể ưu tiên sự tạo thành các chất thơm có thể bao gồm các trị số WHSV thấp hơn, nhiệt độ cao hơn và/hoặc áp suất riêng phần của các chất phản ứng cao hơn. Các sản phẩm thơm có thể thường gồm có các chất thơm từ C₆ đến C₁₁, với các chất thơm C₆, C₇ và/hoặc C₈ thường được ưu tiên hơn. Ví dụ, các sản phẩm được ưu tiên có thể gồm có benzen (C₆), toluen (C₇), và/hoặc xylen (C₈).

Sáng chế được minh họa bởi các ví dụ sau mà không nhằm để giới hạn sáng chế.

Ví dụ thực hiện sáng chế

Ví dụ 1. Điều chế N²,N²,N²,N⁵,N⁵,N⁵,3a,6a - octametyloctahydropentalen-2,5-diamoni dihydroxit

Cho dung dịch mới được điều chế và được trộn đều gồm NaHCO₃ với lượng 5,6g trong 360,0ml H₂O (pH=8) vào 48,2ml (526,3mmol) dimetyl 1,3-acetondicarboxylat tiếp theo là 23,0mL (263,2mmol) 2,3-butanodion được bổ sung. Giữ hỗn hợp ở điều kiện khuấy liên tục trong 72 giờ. Sau khoảng thời gian này kết tủa dư thu được được lọc ở điều kiện chân không và lạnh trong bể đá, hỗn hợp được axit hóa đến độ pH=5 bằng HCl (5%). Kết tủa thô được chiết ba lần bằng CHCl₃, rửa tập hợp các pha hữu cơ bằng nước muối và làm khô chúng trên MgSO₄. Hỗn hợp được lọc qua bộ lọc gấp nếp và phần nước lọc ra thu được được cô đặc trong chân không và được sử dụng trong giai đoạn sau mà không cần quá trình làm sạch thêm.

Chất rắn sản phẩm phản ứng được tạo huyền phù trong hỗn hợp gồm 300,00ml HCl (1M) và 30,0ml axit axetic băng và sau đó được gia nhiệt dưới điều kiện chảy ngược dòng trong 24h. Hỗn hợp thu được đầu tiên được làm nguội đến nhiệt độ phòng và sau đó trong bể đá, sau đó chiết năm lần bằng CH₂Cl₂, làm khô tập hợp các pha hữu cơ trên MgSO₄. Kết tủa thô thu được được lọc qua bộ lọc gấp nếp và được cô đặc trong chân không thu được 32,7g (75%) dixeton, 3a,6a-dimetyltetrahydropentalen-2,5(1H,3H)-dione mong muốn.

Dixeton này được biến tính thành diamin tương ứng bằng các phương pháp như được mô tả dưới đây. Làm lạnh dung dịch dimetylamin với lượng 350,0ml trong metanol nồng độ 1,0M trong bể đá và phía trên nó được nhỏ giọt dung dịch HCl 5N trong MeOH đến khi đạt độ pH=7 đến 8. Sau đó dixeton đã điều chế trước đó được bổ sung với lượng 16,7g (100,7mmol) được hòa tan trong MeOH với lượng tối thiểu có

thể, tiếp theo là NaBH_3CN với lượng 10,2 g (161,2 mmol) được bổ sung. Nhiệt độ được cho phép tăng đến nhiệt độ phòng và giữ ở điều kiện khuấy trong 72 giờ.

Lượng NaBH_3CN dư nếu có được trung hòa bằng cách thêm HCl 5N trong MeOH đến khi đạt độ $\text{pH}=2$, thể HCN được tạo thành bằng dòng N_2 đến khi dung dịch bão hòa trong KOH . Hỗn hợp được cô đặc một phần trong chân không và sản phẩm thô thu được được bazơ hóa bằng dung dịch KOH (25%) đến khi đạt độ $\text{pH}=12$ và được bão hòa với NaCl . Sản phẩm thô thu được được chiết ba lần bằng CH_2Cl_2 , làm khô tập hợp các pha hữu cơ trên MgSO_4 . Nó được cô đặc trong chân không thu được 21,4g (95%) diamin, $\text{N}_2, \text{N}_2, \text{N}^5, \text{N}^5, 3a, 6a$ hexametyloctahydro-pentalen-2,5-diamin mong muốn.

Tiếp theo, diamin được chuyển hóa thành diamoni xeton bậc 4. Để làm điều đó, diamin thu được trước đó với lượng 21,6g được hòa tan trong 100,0ml MeOH và để nó được bổ sung chậm chậm bằng phễu bù áp suất, CH_3I với lượng 45,0ml (722,8 mmol) được pha loãng trong 40,0ml MeOH . Gần như ngay lập tức kết tủa màu vàng xuất hiện. Hỗn hợp giữ ở điều kiện khuấy liên tục trong 72 giờ và sau đó CH_3I với lượng 45,0ml (722,8 mmol) được bổ sung vào và giữ ở điều kiện khuấy liên tục đến khi đủ một tuần. Kết tủa thu được được lọc trong chân không, rửa bằng diethyl ete dư, cung cấp 37,1g muối amoni bậc bốn mong muốn ở dạng iốtua, $\text{N}^2, \text{N}^2, \text{N}^2, \text{N}^5, \text{N}^5, \text{N}^5, 3a, 6a$ -octametyloctahydropentalen-2,5-diamoni diiốtua.

Phần nước lọc ra được cô đặc trong chân không và chất rắn sệt thu được được rửa với axeton dư, và kết tủa mới xuất hiện mà sau khi lọc và làm khô trong chân không thu được muối amoni khác với lượng 2,0g (80%).

Iốtua của ion dương được chiết bằng hydroxit sử dụng một loại nhựa trao đổi ion phù hợp với các phương pháp sau đây: iốtua của ion dương (RI_2) với lượng 20g (44mmol) được hòa tan trong nước. Dung dịch thu được được bổ sung nhựa Dowex SBR với lượng 89g và giữ dung dịch ở điều kiện khuấy đến ngày hôm sau. Tiếp theo, dung dịch được lọc, được rửa bằng nước cất và dung dịch $\text{N}^2, \text{N}^2, \text{N}^2, \text{N}^5, \text{N}^5, \text{N}^5, 3a, 6a$ dihydroxit - octametyloctahydropentalen-2,5-diamoni ($\text{R}(\text{OH})_2$) thu được mà được chuẩn độ bằng HCl (trong nước), sử dụng phenolphthalein làm chất chỉ thị, hiệu quả thu được trong trao đổi lớn hơn 92%.

Dung dịch cuối cùng chứa hydroxit với lượng 0,47 đương lượng mỗi 1000g dung dịch.

Ví dụ 2. Điều chế zeolit ITQ-55.

Dung dịch nước của silic oxit dạng keo tại nồng độ 40% (Ludox ACE-40) với lượng 6g được bổ sung vào 42,5g dung dịch $N^2, N^2, N^2, N^5, N^5, N^5, 3a, 6a$ -octametyloctahydropentalen 2,5-diamoni dihydroxit - $(R(OH)_2)$ mà chứa 0,47 đương lượng hydroxit trong 1000g. Hỗn hợp thu được bay hơi trong điều kiện khuấy cho đến khi loại bỏ hoàn toàn nước dư đến khi thu được thành phần cuối cùng mà được biểu thị. Cuối cùng, dung dịch của amoni florua với lượng 0,74g được bổ sung vào 2,5g nước. Thành phần của gel là:

SiO_2 : 0,25 $R(OH)_2$: 0,5 NH_4F : 5 H_2O .

Hỗn hợp thu được được đưa vào nồi hấp được cung cấp lớp ống bọc bằng polytetrafloetylen bên trong và nước được làm nóng ở nhiệt độ 150°C trên 10 ngày trong lò điện được cung cấp hệ thống quay. Nhiều xạ tia X chất rắn thu được từ việc lọc, rửa bằng nước cất và làm khô ở 100°C được thể hiện trên Fig.1 và đưa ra danh sách các đỉnh đặc trưng nhất mà xuất hiện trong bảng III. Nung ở 800°C trong không khí trong 3 giờ cho phép loại bỏ các loại chất hữu cơ bị giữ. Ảnh nhiễu xạ tia X của zeolit ITQ-55 được nung được thể hiện trên Fig.2 và đưa ra các đỉnh đặc trưng nhất mà xuất hiện trong bảng IV và chỉ ra vật liệu ổn định trong suốt quy trình này.

Ví dụ 3. Điều chế zeolit ITQ-55.

Tetraethylorthosilicat (TEOS) với lượng 8g được bổ sung vào 40,8g dung dịch $N^2, N^2, N^2, N^5, N^5, N^5, 3a, 6a$ -octametyloctahydropentalen- 2,5-diamoni dihydroxit $(R(OH)_2)$ mà chứa 0,47 đương lượng hydroxit trong 1000g. Hỗn hợp được để bay hơi trong điều kiện khuấy đến khi loại bỏ hoàn toàn etanol đến từ sản phẩm thủy phân của TEOS cộng với lượng nước cần thiết đến khi đạt được chế phẩm cuối cùng mà được biểu thị. Cuối cùng, dung dịch của axit hydrofluoric với lượng 0,77g được bổ sung (50% của HF theo trọng lượng). Thành phần của gel là:

SiO_2 : 0,25 $R(OH)_2$: 0,5 HF: 5 H_2O .

Hỗn hợp thu được được đưa vào nồi hấp được cung cấp lớp ống bọc bằng polytetrafloetylen bên trong và nước được làm nóng ở nhiệt độ 150°C trên 10 ngày

trong lò điện được cung cấp hệ thống quay. Chất rắn thu được trong quá trình lọc, rửa bằng nước cất và làm khô ở nhiệt độ 100°C là ITQ-55.

Ví dụ 4. Điều chế zeolit ITQ-55.

Dung dịch nước của silic oxit dạng keo tại nồng độ 40% (Ludox ACE-40) với lượng 6g được bổ sung vào 42,5g dung dịch $N^2, N^2, N^2, N^5, N^5, N^5, 3a, 6a$ -octametyloctahydropentalen 2,5-diamoni dihydroxit - $(R(OH)_2)$ mà chứa 0,47 đương lượng hydroxit trong 1000g. Sau đó alumium hydroxit (57% Al_2O_3) với lượng 0,14g được bổ sung và hỗn hợp thu được được bốc hơi trong điều kiện khuấy cho đến khi loại bỏ hoàn toàn nước dư đến khi thu được thành phần cuối cùng mà được biểu thị. Cuối cùng, dung dịch của amoni florua với lượng 0,74g được bổ sung vào 2,5g nước. Thành phần của gel là:



Hỗn hợp thu được được đưa vào nồi hấp được cung cấp lớp ống bọc bằng polytetrafloetylen bên trong và nước được làm nóng ở nhiệt độ 150°C trên 14 ngày trong lò điện được cung cấp hệ thống quay. Chất rắn thu được từ quá trình lọc, rửa bằng nước cất và làm khô ở nhiệt độ 100°C đưa ra nhiều xạ tia X mà được thể hiện trên Fig.3 và biểu thị nó là zeolit ITQ-55.

Ví dụ 5. Điều chế zeolit ITQ-55.

Ti tetraethoxide (IV) (TEOTi) với lượng 0,087 được bổ sung vào 8g tetraethylorthosilicat (TEOS). Tiếp theo 40,8g dung dịch $N^2, N^2, N^2, N^5, N^5, N^5, 3a, 6a$ -octametyloctahydropentale- 2,5-diamoni dihydroxit $(R(OH)_2)$ mà chứa 0,47 đương lượng hydroxit trong 1000g được bổ sung. Hỗn hợp thu được được bay hơi trong điều kiện khuấy đến khi loại bỏ hoàn toàn etanol đến từ sản phẩm thủy phân của TEOS và TEOTi cộng với lượng nước cần thiết đến khi đạt được thành phần cuối cùng mà được biểu thị. Cuối cùng, dung dịch của axit hydrofluoric (50% của HF theo trọng lượng) với lượng 0,77g được bổ sung. Thành phần của gel là:



Hỗn hợp thu được được đưa vào nồi hấp được cung cấp lớp ống bọc bằng polytetrafloetylen bên trong và nước được làm nóng ở nhiệt độ 150°C trên 14 ngày trong lò điện được cung cấp hệ thống quay. Chất rắn thu được trong quá trình lọc, rửa bằng nước cất và làm khô ở nhiệt độ 100°C là ITQ-55.

Ví dụ 6. Điều chế zeolit ITQ-55.

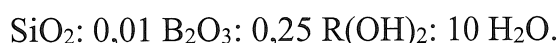
Dung dịch nước của silic oxit dạng keo tại nồng độ 40% (Ludox ACE-40) với lượng 6g được bổ sung vào 42,5 g dung dịch $N^2,N^2,N^2,N^5,N^5,N^5,3a,6a$ -octametyloctahydropentalen 2,5-diamoni dihydroxit - $(R(OH)_2)$ mà chứa 0,47 đương lượng hydroxit trong 1000g. Tiếp theo H_3BO_3 với lượng 0,1g được bổ sung và hỗn hợp thu được được bốc hơi trong điều kiện khuấy cho đến khi loại bỏ hoàn toàn nước dư đến khi thu được thành phần cuối cùng mà được biểu thị. Cuối cùng, dung dịch của amoni florua với lượng 0,74g được bổ sung vào 2,5g nước. Thành phần của gel là:



Hỗn hợp thu được được đưa vào nồi hấp được cung cấp lớp ống bọc bằng polytetrafloetylen bên trong và nước được làm nóng ở nhiệt độ $150^\circ C$ trên 14 ngày trong lò điện được cung cấp hệ thống quay. Chất rắn thu được trong quá trình lọc, rửa bằng nước cất và làm khô ở nhiệt độ $100^\circ C$ là ITQ-55.

Ví dụ 7. Điều chế zeolit ITQ-55.

Cho tetraethylorthosilicat (TEOS) với lượng 8g bổ sung vào 36,6g dung dịch $N^2,N^2,N^2,N^5,N^5,N^5,3a,6a$ -octametyloctahydropentalen-2,5-diamoni dihydroxit $(R(OH)_2)$ mà chứa 0,53 đương lượng hydroxit trong 1000g. Tiếp theo H_3BO_3 với lượng 0,0476g được bổ sung. Hỗn hợp thu được bay hơi ở điều kiện khuấy đến khi loại bỏ hoàn toàn etanol có từ sản phẩm thủy phân của TEOS cộng với lượng nước cần thiết đến khi đạt được thành phần cuối cùng mà được biểu thị. Thành phần của gel là:



Hỗn hợp thu được được đưa vào nồi hấp được cung cấp lớp ống bọc bằng polytetrafloetylen bên trong và nước được làm nóng ở nhiệt độ $150^\circ C$ trên 14 ngày trong lò điện được cung cấp hệ thống quay. Chất rắn thu được trong quá trình lọc, rửa bằng nước cất và làm khô ở nhiệt độ $100^\circ C$ là ITQ-55.

Ví dụ 8. Điều chế zeolit ITQ-55.

Cho tetraethylorthosilicat (TEOS) với lượng 8g bổ sung vào 36,3 g dung dịch $N^2,N^2,N^2,N^5,N^5,N^5,3a,6a$ -octametyloctahydropentalen-2,5-diamoni dihydroxit $(R(OH)_2)$ mà chứa 0,532 đương lượng hydroxit trong 1000g. Tiếp theo GeO_2 với lượng 0,805g được bổ sung. Hỗn hợp thu được bay hơi ở điều kiện khuấy đến khi loại

bỏ hoàn toàn etanol có từ sản phẩm thủy phân của TEOS cộng với lượng nước cần thiết đến khi đạt được thành phần cuối cùng mà được biểu thị. Thành phần của gel là:

SiO_2 : 0,2 GeO_2 : 0,25 $\text{R}(\text{OH})_2$: 10 H_2O .

Hỗn hợp thu được được đưa vào nồi hấp được cung cấp lớp ống bọc bằng polytetrafluetylen bên trong và nước được làm nóng ở nhiệt độ 150°C trên 14 ngày trong lò điện được cung cấp hệ thống quay. Chất rắn thu được trong quá trình lọc, rửa bằng nước cất và làm khô ở nhiệt độ 100°C là ITQ-55.

Ví dụ 9. Hấp phụ CO_2 ở 30°C trong vật liệu ITQ-55 của ví dụ 2.

Đo khả năng hấp phụ CO_2 của vật liệu ITQ-55, được điều chế theo Ví dụ 2, ở 30°C và 9bar tương ứng với 2,96mmol/g. Tương tự, trị số thu được sau khi thực hiện 20 chu trình hấp phụ/giải hấp phụ là 2,95mmol/g, chứng tỏ rằng vật liệu ITQ-55 bảo toàn được khả năng hấp phụ của nó sau số chu trình cao.

Ví dụ 10. Hấp phụ CO_2 ở 60°C trong vật liệu ITQ-55 của ví dụ 2.

Đo khả năng hấp phụ CO_2 của vật liệu ITQ-55, được điều chế theo Ví dụ 2, ở 60°C và 9bar tương ứng với 2,35mmol/g.

Ví dụ 11. Hấp phụ metan ở 60°C trong vật liệu ITQ-55 của ví dụ 2.

Đo khả năng hấp phụ metan của vật liệu ITQ-55, được điều chế theo ví dụ 2, ở 60°C và 9bar tương ứng với 0,22 mmol/g, sau khi làm cân bằng trong 24 giờ tại nhiệt độ và áp suất này.

Ví dụ 12. Hấp phụ metan ở 30°C trong vật liệu ITQ-55 của ví dụ 2.

Đo khả năng hấp phụ metan của vật liệu ITQ-55, được điều chế theo ví dụ 2, ở 30°C và 9bar tương ứng với 0,18mmol/g sau khi làm cân bằng trong 24 giờ tại nhiệt độ và áp suất này. Khả năng hấp phụ thấp nhất dưới các điều kiện này về một trị số đo trong ví dụ 5 cho thấy sự giảm khả năng khuếch tán của metan qua các lỗ của zeolit ITQ-55.

Ví dụ 13. Xác định độ chọn lọc trong phân tách CO_2 và metan trong vật liệu ITQ-55 của Ví dụ 2.

Độ chọn lọc trong phân tách metan và CO_2 đã được xem xét qua tỷ lệ các trị số hấp phụ của các đường đẳng nhiệt của các khí tinh khiết CO_2 và metan tại nhiệt độ và áp suất giống nhau. Được xem xét là độ chọn lọc trong quy trình phân tách sẽ tốt hơn

đến mức mà tỷ số nằm trong các trị số này lớn hơn. Trên Fig.4, sự biến thiên của tỷ số này được thể hiện với áp suất khí tại các nhiệt độ khác nhau.

Ví dụ 14. Hấp phụ etan ở 30°C trong vật liệu ITQ-55 của ví dụ 2.

Đo khả năng hấp phụ của etan của vật liệu ITQ-55, được điều chế theo ví dụ 2, ở 30°C và 9bar tương ứng với 0,14mmol/g sau khi làm cân bằng trong 24 giờ tại nhiệt độ và áp suất này.

Ví dụ 15. Hấp phụ etylen ở 30°C trong vật liệu ITQ-55 của ví dụ 2.

Đo khả năng hấp phụ etylen của vật liệu ITQ-55, được điều chế theo Ví dụ 2, ở 30°C và 9bar tương ứng với 0,75 mmol/g sau khi làm cân bằng trong 24 giờ tại nhiệt độ và áp suất này.

Ví dụ quy trình 1. Mô hình hóa các biến thiên cấu trúc Zeolit

Để khảo sát thêm về cấu trúc lỗ của ITQ-55, những quá trình mô hình hóa động học phân tử của cấu trúc ITQ-55 được thực hiện trên ô đơn vị, với học thuyết hàm số tỷ trọng được sử dụng để xác định tương tác giữa các nguyên tử trong ô đơn vị. Điều kiện biên ô tuần hoàn được sử dụng để cung cấp hiệu quả lưới "vô hạn". Mô hình hóa động học phân tử được thực hiện trong tập hợp NPT để cấp cho các biến thiên thể tích của ô đơn vị. Sử dụng thuyết hàm tỷ trọng, cấu trúc ô đơn vị tối ưu theo Ångstrom được tính toán là 22,58 (a); 13,51 (b) và 14,74 (c). Điều đó có thể so sánh với cấu trúc ô đơn vị được xác định bằng nhiễu xạ tia X, mà là 22,39 (a); 13,34 (b); 14,5 (c). Về kích thước của cửa sổ lỗ nhỏ nhất, cửa sổ kích thước tối thiểu được xác định bằng thuyết hàm tỷ trọng cho cấu trúc tối ưu là 2,37 Ångstrom. Cửa sổ lỗ nhỏ nhất được xác định từ dữ liệu nhiễu xạ tia X là 2,07 Ångstrom. Cần lưu ý rằng mỗi kích thước tối thiểu này về cơ bản nhỏ hơn kích thước của nhiều phân tử (chẳng hạn như N₂ và CO₂) mà được theo dõi như được hấp phụ trong mạng lưới lỗ ITQ-55.

Fig.11 thể hiện cách kích thước của ô đơn vị biến thiên trong suốt quá trình mô hình hóa động học phân tử mà thuyết hàm tỷ trọng được sử dụng cho các tiềm năng tương tác. Trên Fig.11, các dòng 1110, 1120, và 1130 lần lượt thể hiện các tham số (theo Ångstrom) của ô đơn vị được xác định từ dữ liệu nhiễu xạ tia X. Các dòng 1112, 1122, và 1132 lần lượt thể hiện các tham số của ô đơn vị cho cấu trúc tối ưu như được xác định bởi thuyết hàm tỷ trọng. Các dòng 1114, 1124, và 1134 lần lượt thể hiện các tham số của ô đơn vị khi biến thiên trong suốt trạng thái động học phân tử tập hơn

NPT tại nhiệt độ 300K (26,85°C). Như được thể hiện trên Fig.11, tham số "c" của ô đơn vị thể hiện thay đổi lớn nhất về kích thước giữa cấu trúc DFT tối ưu và các thay đổi về kích thước được tính toán tại nhiệt độ 300K (26,85°C).

Fig.12 thể hiện các kết quả bổ sung từ các mô hình hóa động học phân tử liên quan đến kích thước khe hở (hoặc lỗ) tối thiểu trong ô đơn vị. Fig.12 thể hiện thay đổi trong khoảng cách giữa các nguyên tử oxy trên các phía đối diện của vòng 8 cạnh nhỏ nhất trong cấu trúc ô đơn vị trong suốt quá trình mô hình hóa động học phân tử tại các nhiệt độ khác nhau. Các nhiệt độ mô hình hóa tương ứng là 200K (1210), 300K (1220), 400K, 600K và 1100K. Nên lưu ý rằng tổng lượng thời gian được mô hình hóa để tạo ra các kết quả trên Fig.12 tương ứng đến khoảng 6 phần nghìn nano giây. Bất chấp lượng thời gian ngắn, kích thước của khoảng cách lỗ tối thiểu có thể về cơ bản thay đổi, như được thể hiện trên Fig.12. Cụ thể, tại các nhiệt độ cao hơn khoảng cách lỗ tối thiểu lớn nhất được tính toán bằng các mô hình hóa gần 3,6 Ångstrom, mà tương ứng với kích thước của các phân tử lớn nhất (chẳng hạn như N_2) mà được tin rằng có khả năng đi vào mạng lưới lỗ ITQ-55. Không có giới hạn cho lý thuyết cụ thể nào, các kết quả mô hình hóa tại các nhiệt độ cao hơn có thể có xu hướng thể hiện khả năng đường dẫn dạng lỗ kích thước tối thiểu của ITQ-55 mở rộng, sao cho các phân tử lớn hơn có thể đi vào, trong khi loại trừ các phân tử khác vượt qua kích thước cắt mép. Cần lưu ý rằng nhiệt độ giảm, kích thước trung bình của khoảng cách tối thiểu lộ ratăng (như được thể hiện bởi vị trí của đỉnh cực đại), nhưng lượng biến thiên quanh kích thước trung bình giảm (sự phân phối hẹp hơn).

Ví dụ quy trình 2. Các đặc tính hấp phụ

Fig.13 thể hiện đường đẳng nhiệt hấp phụ tại 28°C cho các tinh thể ITQ-55 tại áp suất gần với môi trường xung quanh. Trên Fig.13, lượng thành phần được hấp phụ theo mmol trên mỗi gam ITQ-55 được thể hiện liên quan đến áp suất. Như được thể hiện trên Fig.13, CO_2 bị hấp phụ nhanh chóng bởi ITQ-55. N_2 và Ar cũng bị hấp phụ, mặc dù với lượng nhỏ hơn. Ngược lại, về cơ bản metan không bị hấp phụ khi quan sát ở 28°C. Các đường đẳng nhiệt trên Fig.13 thể hiện cho thấy rằng ITQ-55 có thể phù hợp để phân tách CO_2 , N_2 hoặc Ar ra khỏi các phân tử lớn hơn như metan. Ngoài ra, các đường đẳng nhiệt trên Fig.13 đề xuất việc phân tách CO_2 ra khỏi N_2 có thể cũng khả thi.

Fig.14 thể hiện các đường đẳng nhiệt hấp phụ CO_2 và N_2 với khoảng áp suất mở rộng tại nhiệt độ 30°C . Như được thể hiện trên Fig.14, ITQ-55 cho thấy có khả năng đáng kể trong việc hấp phụ CO_2 và N_2 khi áp suất tăng. Dữ liệu trên Fig.14 đề xuất việc phân tách cân bằng gồm CO_2 và N_2 có thể bị giới hạn độ chọn lọc.

Fig.15 thể hiện nhiệt cùng vị trí hấp phụ cho CO_2 và N_2 . Như được thể hiện trên Fig.15, nhiệt hấp phụ CO_2 có thấy bằng khoảng 2 lần trị số nhiệt hấp phụ N_2 , với nhiệt hấp phụ gần như độc lập với lượng hấp thu trước đó.

Fig.16 thể hiện tải cân bằng N_2 theo mol trên mỗi kg của ITQ-55 tại nhiệt độ 5°C và 25°C . Như được thể hiện trên Fig.16, ITQ-55 cho thấy có khả năng hấp phụ tăng lên với N_2 khi nhiệt độ bị giảm đi. Dựa vào việc hấp phụ tối thiểu metan và các hydrocarbon lớn hơn bằng ITQ-55, Fig.16 đề xuất rằng ITQ-55 có thể phù hợp để thực hiện phân tách chọn lọc N_2 ra khỏi metan (hoặc các hợp chất lớn hơn) tại nhiệt độ gần với nhiệt độ môi trường xung quanh hoặc nhiệt độ thấp hơn môi trường xung quanh.

Fig.17 thể hiện tải cân bằng của H_2O trên ITQ-55 so với zeolit 5A, zeolit thông thường được sử dụng để phân tách. Như được thể hiện trên Fig.17, ITQ-55 có khả năng hấp thu nước thấp hơn so với zeolit thông thường. Điều đó có thể có ích trong việc giảm hoặc tối thiểu hóa việc hấp phụ nước trong các quy trình phân tách gồm hai thành phần khác trong đó nước là thành phần ít trong dòng khí.

Fig.18 thể hiện các đường đẳng nhiệt hấp phụ tại nhiệt độ 28°C của C_2H_4 , Ar, Kr và CH_4 . Tương tự, Fig.13, quan sát thấy hấp phụ rất ít hoặc thậm chí không hấp phụ CH_4 . Điều đó ngược với etylen, etylen được hấp phụ đủ để đề xuất rằng ITQ-55 có thể thích hợp để phân tách etylen ra khỏi metan. Ar và Kr cũng thể hiện sự phân tách đủ để có thể phân tách ra khỏi metan và các hydrocarbon lớn hơn.

Fig.19 thể hiện so sánh hấp phụ cân bằng của metan và etylen tại áp suất 1bar (101 kPa) và nhiệt độ 28°C . Như được thể hiện trên Fig.19, ITQ-55 thực sự có độ chọn lọc để hấp phụ etylen so với metan.

Fig.20 thể hiện các đường đẳng nhiệt hấp phụ H_2 tại áp suất lên đến 10bar (khoảng 1 MPa) tại nhiệt độ -10°C và CH_4 tại 28°C . Tương tự như những so sánh khác, H_2 được hấp phụ về cơ bản lượng lớn hơn CH_4 . Dữ liệu trên Fig.20 đề xuất rằng ITQ-55 có thể thích hợp cho việc phân tách động học H_2 ra khỏi CH_4 .

Mặc dù ITQ-55 chỉ cung cấp sự hấp phụ rất nhỏ CH_4 , theo quan điểm động học sự hấp phụ CH_4 bất kỳ mà xảy ra cho thấy là nhanh hơn hấp phụ etylen. Fig.21 thể hiện sự hấp phụ như hàm căn bậc hai của thời gian tại áp suất 1bar (101kPa) và nhiệt độ 30°C cho CO_2 (2110), N_2 (2120), CH_4 (2130), và C_2H_4 (2140). Fig.21 cũng thể hiện đường cong phù hợp dựa trên mô hình khuếch tán (2150) cho hấp phụ CO_2 . Trục x được chọn lọc dựa trên mối quan hệ đặc thù của sự khuếch tán với căn bậc hai của thời gian. Trục y được chuẩn hóa tương đối với lượng hấp phụ để cho phép dễ dàng so sánh các tỉ lệ khuếch tán. Như được thể hiện trên Fig.21, N_2 và CO_2 được hấp phụ nhanh hơn CH_4 , nhưng etylen thực sự bị hấp phụ chậm hơn.

Bảng 101 thể hiện các trị số độ khuếch tán được tính toán dựa trên các trị số hấp phụ đo được trên Fig.21. Các trị số độ khuếch tán trên bảng 101 được tính toán cho kích thước tinh thể ITQ-55 là $60\mu\text{m}$. Dựa trên các trị số độ khuếch tán, bảng 101 cũng thể hiện độ chọn lọc theo động học. Như được thể hiện trên bảng 101, ITQ-55 thể hiện độ chọn lọc theo động học cao bất ngờ của CO_2 đối với CH_4 .

Bảng 101. Các hằng số thời gian khuếch tán D/R^2 [1/s] của N_2 , CO_2 , CH_4 , C_2H_4 và C_2H_6 trong $60\mu\text{m}$ tinh thể ITQ-55 được thể hiện trên Fig.23A và Fig.23B được đo tại nhiệt độ 30°C , và độ chọn lọc theo động học lý tưởng.

N_2	CO_2	CH_4	C_2H_4	C_2H_6	Độ chọn lọc theo động học CO_2/CH_4	Độ chọn lọc theo động học N_2/CH_4	Độ chọn lọc theo động học $\text{C}_2\text{H}_4/\text{C}_2\text{H}_6$
$2,4 \times 10^{-4}$	$3,3 \times 10^{-3}$	$<1,0 \times 10^{-5}$	$3,0 \times 10^{-3}$	$6,6 \times 10^{-3}$	>300	>20	>40

Fig.22 thể hiện dữ liệu bổ sung liên quan đến việc hấp thu như hàm thời gian của N_2 (2210), CO_2 (2220), CH_4 (2230), C_2H_6 (2240), và C_2H_4 (2250). Dữ liệu trên Fig.22 tương ứng với hấp thu tại 700mbar (70 kPa), ngoại trừ N_2 tại 1000mbar (101 kPa). Như được thể hiện trên Fig.22, xảy ra sự hấp thu rất ít hoặc không hấp thu CH_4 và C_2H_6 . Cả C_2H_4 và N_2 cho thấy sự hấp thu chậm theo thời gian, với một tải lớn hơn đáng kể của C_2H_4 đạt được với khoảng thời gian dài. Sự hấp phụ CO_2 nhanh hơn so

với sự hấp thụ của một trong hai C_2H_4 hoặc N_2 , cho thấy khả năng thực hiện phân tách theo động học CO_2 so với các thành phần này.

Độ chọn lọc hấp phụ cân bằng cũng được tính toán. Bảng 102 thể hiện các trị số hấp thụ được tính toán dựa trên các trị số hấp phụ đo được trên Fig.22. Cần lưu ý rằng cả CH_4 và C_2H_6 thể hiện sự hấp phụ rất nhỏ trên ITQ-55. Dựa trên các trị số hấp thụ, bảng 102 cũng thể hiện độ chọn lọc hấp phụ. Như được thể hiện trên bảng 102, ITQ-55 thể hiện độ chọn lọc theo động học cao bất ngờ của CO_2 so với CH_4 .

Bảng 102. Khả năng hấp thụ N_2 , CO_2 , CH_4 , C_2H_4 và C_2H_6 trên ITQ-55 được đo tại nhiệt độ $30^\circ C$ và độ chọn lọc hấp phụ lý tưởng.

hấp thụ N_2 mmol/g (áp suất)	hấp thụ CO_2 , mmol/g (áp suất)	hấp thụ* CH_4 mmol/g (áp suất)	hấp thụ C_2H_4 , mmol/g (áp suất)	hấp thụ* C_2H_6 , mmol/g (áp suất)	Độ chọn lọc hấp phụ CO_2/C H_4	Độ chọn lọc hấp phụ N_2/CH 4	Độ chọn lọc hấp phụ C_2H_4/C_2H_6
0,16 (970mbar)	0,94 (536mbar)	0,015 (600mbar)	0,40 (570mbar)	0,08 (595mbar)	62,7	10,7	5,0

Fig.28 thể hiện các đường đẳng nhiệt hấp phụ được tính toán cho axetylen trên ITQ-55. Axetylen được tin rằng có đường kính động học tương tự như CO_2 và do đó được kỳ vọng có thể đi vào/khuyếch tán vào trong cấu trúc lỗ của ITQ-55. Để nghiên cứu sự hấp phụ của axetylen, các mô phỏng Grand Canonical Monte Carlo được thực hiện để hấp phụ axetylen trên bề mặt tinh thể ITQ-55. Để so sánh, các mô phỏng cũng được thực hiện đối với sự hấp phụ CO_2 và N_2 để tính toán các đường đẳng nhiệt hấp phụ. Như được thể hiện trên Fig.28, axetylen (C_2H_2) được dự đoán là được hấp phụ với lượng lớn hơn N_2 , nhưng với lượng thấp hơn so với CO_2 , ở khoảng áp suất thấp từ khoảng 0bar đến khoảng 30 bar (3 MPa).

Ví dụ quy trình 3. Đặc tính SEM bổ sung

Các hình vẽ Fig.23A và Fig.23B thể hiện các hình ảnh hiển vi điện tử quét (scanning electron microscopy - SEM) của các tinh thể ITQ-55. Các hình ảnh thể hiện các tinh thể tạo lớp lớn với kích thước từ khoảng 50 μ m đến khoảng 70 μ m.

Ví dụ quy trình 4. Các đặc tính khuếch tán

Các hình vẽ Fig.24 và Fig.25 thể hiện các nghiên cứu động học với đáp ứng tần số đối với CH₄ và CO₂ (Fig.24) và N₂ (Fig.25) trên mẫu ITQ-55. Fig.24 tương ứng với CH₄ và CO₂ ở 30°C và áp suất 0,1 bar (10kPa). Trên Fig.24, đường phù hợp với dữ liệu CH₄ tương ứng với đường 2411, trong khi đường phù hợp cho dữ liệu CO₂ tương ứng với đường 2421. Các kết quả thể hiện rằng CH₄ trên ITQ-55 hoạt động như He mà không có hiện tượng hấp phụ trực quan đối với các phạm vi tần số được nghiên cứu. Hằng số thời gian khuếch tán CO₂ trong các tinh thể 60 μ m của mẫu ITQ-55 được thể hiện trên các hình vẽ Fig.23A và Fig.23B là 0,003/giây.

Fig.25 tương ứng với sự hấp phụ N₂ ở ba nhiệt độ là -70°C (2510), -20°C (2520), 30°C (2530) và cùng áp suất là 1bar (101kPa). Để so sánh, sự hấp phụ He ở 30°C và 1bar cũng được thể hiện (2540). Ở các tần số thấp, các đường cong đáp ứng tần số tiếp cận trạng thái ổn định để phản ánh trạng thái cân bằng và độ dốc đường đẳng nhiệt có thể được định lượng bởi chênh lệch giữa trạng thái ổn định của các thí nghiệm N₂ và Heli. Các kết quả thể hiện N₂ hấp phụ nhiều hơn ở nhiệt độ -70°C nhưng với độ khuếch tán chậm hơn. N₂ có dung lượng nhiều hơn xấp xỉ 3 lần ở nhiệt độ -70°C so với nhiệt độ 30°C. Hằng số thời gian khuếch tán N₂ trong các tinh thể 60 μ m của mẫu ITQ-55 được thể hiện trên các hình vẽ Fig.23A và Fig.23B là 0,0004/giây ở 30°C và giảm xuống đến 0,00028/giây ở -20°C. So sánh độ khuếch tán của N₂ và CO₂ ở các điều kiện tương tự (30°C), độ chọn lọc theo động học là khoảng 8. Ngoài ra, độ chọn lọc theo động học lớn hơn là để phân tách của N₂ và CH₄/CO₂.

Fig.27 thể hiện các kết quả ZLC đối với CO₂ trong ITQ-55. Các thí nghiệm ZLC được thực hiện trong cột sắc ký nhỏ sử dụng CO₂ với lượng 10% trong heli. Dữ liệu thí nghiệm với thí nghiệm tải riêng phần 2721 phù hợp với mô hình ZLC 2722, và thí nghiệm cân bằng đầy đủ 2711 được dự báo với mô hình 2712 sử dụng các tham số tương tự. Tốc độ khuếch tán trong các tinh thể 60 μ m của mẫu ITQ-55 được thể hiện trên các hình vẽ Fig.23A và Fig.23B đã được định lượng là 0,003 trên giây.

Trên Fig.26, sự phụ thuộc nhiệt độ của các hằng số thời gian khuếch tán đối với etan và etylen được ước lượng từ các thí nghiệm hấp thụ khí đơn lẻ được tiến hành trên thiết bị hấp thụ khí theo thể tích HIDEN IMI sẵn có từ hãng Hiden Isochema. Zeolit ITQ-55 đầu tiên được hoạt hóa ở nhiệt độ 300°C trong chân không động lực trong 4 giờ để loại bỏ hơi ẩm và các loại được hấp phụ trước đó, sau đó được làm mát đến nhiệt độ được chọn. Khí đích được đưa vào trong ô mẫu ở 1,1bar. Sự giảm dần áp suất trong ô mẫu được coi là sự hấp phụ khí trên zeolit. Đường cong hấp thụ khí đo được được sử dụng để ước lượng hằng số thời gian khuếch tán. Dù tải cân bằng không đạt được tại các điều kiện được thể hiện trên Fig.6, các trị số mô phỏng được sử dụng để xác định tải cân bằng. Trình tự được lặp lại ở nhiệt độ tiếp theo và/hoặc đối với khí hấp phụ tiếp theo. Như được thể hiện trên Fig.26, sự phụ thuộc nhiệt độ của hằng số thời gian khuếch tán thể hiện năng lượng hoạt hóa cao hơn của sự khuếch tán đối với etan so với etylen. Ở nhiệt độ gần 25°C, etylen dường như có độ chọn lọc theo động học cao hơn khoảng 50. Khi nhiệt độ tăng, Fig.26 thể hiện rằng độ chọn lọc theo động học đối với etylen so với etan giảm.

Ví dụ dự đoán 1. Phân tách N₂ ra khỏi metan, khí tự nhiên, và các hydrocarbon khác.

Sau đây là ví dụ dự đoán. Các mỏ khí tự nhiên thường có thể bao gồm nitơ như là một phần của tổng thành phần khí. Ngoài ra, trong suốt quá trình khai thác khí tự nhiên, nitơ có thể được đưa vào giếng để hỗ trợ việc khai thác. Quy trình này có thể thường được đề cập đến như "tràn nitơ". Kết quả là, khí tự nhiên có thể thường bao gồm nitơ như "tạp chất". Nitơ thường không gây hại cho nhiều việc sử dụng khí tự nhiên, nhưng nitơ có thể hoạt động như chất pha loãng, làm giảm trị số nhiên liệu của nguồn cấp khí tự nhiên. Do đó, có thể có lợi để giảm hoặc tối thiểu hóa hàm lượng nitơ trong nguồn cấp khí tự nhiên. Nên lưu ý rằng khí tự nhiên thường chứa một phần đáng kể metan, cùng với nhiều loại hydrocarbon nhỏ (C₂ - C₄) khác. Do đó, các kỹ thuật được mô tả ở đây để phân tách nitơ ra khỏi khí tự nhiên cũng có thể thích hợp hơn để phân tách nitơ ra khỏi metan, etan, và các hợp chất hữu cơ khác chứa ba hoặc nhiều hơn ba nguyên tử nặng. Các kỹ thuật này cũng có thể thích hợp để phân tách nitơ ra khỏi etylen và/hoặc acetylen, dù độ chọn lọc có thể khác so với độ chọn lọc đối với các ankan hoặc rượu.

Nitơ có thể được phân tách ra khỏi khí tự nhiên (hoặc các dòng chứa các ankan/hợp chất hữu cơ khác) sử dụng chất hấp phụ và/hoặc màng mà bao gồm zeolit ITQ-55. Việc hấp phụ có thể được thực hiện sử dụng bất kỳ loại quy trình phù hợp nào, như quy trình hấp phụ dao động. Đối với sự phân tách bằng cách hấp phụ, khí tự nhiên (hoặc các dòng khác chứa các ankan/hợp chất hữu cơ) cũng chứa nitơ có thể được tiếp xúc với cấu trúc chất hấp phụ. Bề mặt cấu trúc chất hấp phụ có thể bao gồm và/hoặc chứa zeolit ITQ-55 theo cách sao cho các chất lưu đi vào cấu trúc chất hấp phụ có thể đi vào bằng cách đi qua các lỗ của ITQ-55. Phụ thuộc vào cấu trúc chất hấp phụ, các khuyết tật trong cấu trúc tinh thể ITQ-55 và/hoặc các khuyết tật giữa các tinh thể có thể cho phép một số chất lưu đi vào cấu trúc chất hấp phụ mà không đi qua ITQ-55. Do các khuyết tật này, ít hơn 100% chất lưu đi vào cấu trúc chất hấp phụ có thể đi qua các tinh thể ITQ-55, như ít nhất là khoảng 90% thể tích, hoặc ít nhất là khoảng 95%, hoặc ít nhất là khoảng 98%.

Tương tự, đối với sự phân tách bằng cách thẩm qua màng, khí tự nhiên (hoặc dòng khác chứa các ankan/hợp chất hữu cơ) cũng chứa nitơ có thể được tiếp xúc với cấu trúc màng. Bề mặt cấu trúc màng có thể bao gồm và/hoặc chứa zeolit ITQ-55 theo cách sao cho các chất lưu đi vào cấu trúc màng có thể đi vào bằng cách đi qua các lỗ của ITQ-55. Phụ thuộc vào cấu trúc chất hấp phụ, các khuyết tật trong cấu trúc tinh thể ITQ-55 và/hoặc các khuyết tật giữa các tinh thể có thể cho phép một số chất lưu đi vào cấu trúc màng mà không đi qua ITQ-55. Do các khuyết tật này, ít hơn 100% chất lưu đi vào cấu trúc màng có thể đi qua các tinh thể ITQ-55, như ít nhất là khoảng 90% thể tích, hoặc ít nhất là khoảng 95%, hoặc ít nhất là khoảng 98%.

Trong suốt quy trình phân tách, chất lưu bao gồm khí tự nhiên (hoặc các hydrocarbon hoặc các thành phần hữu cơ khác) và nitơ có thể được tiếp xúc với cấu trúc chất hấp phụ hoặc màng. Dựa trên đường kính động học hoặc ái lực của nitơ đối với ITQ-55, nitơ có thể ưu tiên đi vào cấu trúc chất hấp phụ hoặc màng so với metan hoặc các hợp chất hữu cơ khác. Điều này có thể cho phép độ chọn lọc đối với nitơ trên metan hoặc hợp chất hữu cơ khác, hoặc với sự hấp phụ hoặc với sự phân tách thông qua màng, ít nhất là khoảng 5, hoặc ít nhất là khoảng 10, hoặc ít nhất là khoảng 20, hoặc ít nhất là khoảng 30.

Một cách tùy ý, sự phân tách bằng hấp phụ hoặc bằng màng có thể được thực hiện ở nhiệt độ dưới 300K (26,85°C), như thấp hơn hoặc bằng 275K (1,85°C), hoặc thấp hơn hoặc bằng 250K (-23,15°C), hoặc thấp hơn hoặc bằng 225K (-48,15°C), hoặc thấp hơn hoặc bằng 200K (-73,15°C). Điều này có thể tăng cường độ chọn lọc của ITQ-55 để thực hiện sự phân tách, cũng như có khả năng tăng khả năng giữ nitơ của cấu trúc chất hấp phụ. Một cách tùy ý, việc thực hiện sự phân tách ở nhiệt độ thấp có thể cũng có lợi từ việc cho phép nước ngưng tụ khỏi chất lưu trước khi chất lưu được tiếp xúc với cấu trúc chất hấp phụ hoặc màng. Một cách tùy ý, sự phân tách ở nhiệt độ thấp có thể thực hiện ở áp suất phù hợp bất kỳ, như áp suất nhỏ hơn hoặc bằng 1000bar (100MPa). Nên lưu ý rằng ở các điều kiện phân tách này, chất lưu được phân tách có thể tương ứng một cách tùy ý với chất lỏng.

Như lựa chọn khác, việc phân tách có thể được thực hiện ở nhiệt độ khoảng 270K (-3,15°C) đến khoảng 375K (101,85°C) và áp suất nhỏ hơn hoặc bằng khoảng 700bar (70MPa), hoặc nhỏ hơn hoặc bằng khoảng 500bar (50MPa), hoặc nhỏ hơn hoặc bằng khoảng 300bar (30MPa), hoặc nhỏ hơn hoặc bằng khoảng 100bar (10MPa). Dưới các điều kiện này, sự xâm nhập của metan hoặc các hợp chất hữu cơ khác có thể bị giảm, tối thiểu hóa, hoặc có thể bị loại bỏ. Việc tối thiểu hóa sự xâm nhập của metan hoặc các hợp chất hữu cơ khác vào trong cấu trúc chất hấp phụ hoặc cấu trúc màng có thể tạo điều kiện thuận lợi cho việc thực hiện phân tách với độ chọn lọc cao.

Như lựa chọn khác nữa, việc phân tách có thể được thực hiện ở nhiệt độ lớn hơn khoảng 270K (-3,15°C), hoặc lớn hơn khoảng 325K (51,85°C), hoặc lớn hơn khoảng 375K (101,85°C), như lên đến khoảng 600K (326,85°C) hoặc lớn hơn. Ngoài ra hoặc theo cách khác, sự phân tách có thể được thực hiện ở áp suất lớn hơn khoảng 100bar (10MPa), hoặc lớn hơn khoảng 300bar (30MPa), hoặc lớn hơn khoảng 500bar (50MP), hoặc lớn hơn khoảng 700bar (70MPa), như lên đến khoảng 1500bar (150MPa) hoặc lớn hơn. Ngoài ra hoặc theo cách khác, sự phân tách có thể được thực hiện ở bất kỳ tổ hợp khoảng nhiệt độ và áp suất nào được nêu trong đoạn này. Dưới các điều kiện này, một số metan hoặc hợp chất hữu cơ khác có thể có khả năng đi vào cấu trúc chất hấp phụ hoặc cấu trúc màng, nhưng sự phân tách có thể được thực hiện với độ chọn lọc như được mô tả ở trên.

Ví dụ dự đoán 2. Phân tách CO₂ ra khỏi metan, khí tự nhiên, và các hydrocarbon khác.

Sau đây là ví dụ dự đoán. Các mỏ khí tự nhiên thường có thể bao gồm CO₂ như là một phần của thành phần khí tổng. CO₂ thường không gây hại cho những việc sử dụng khí tự nhiên, nhưng CO₂ có thể hoạt động như chất pha loãng, làm giảm trị số nhiệt liệu của nguồn cấp khí tự nhiên. Ngoài ra, đối với một số nguồn khí tự nhiên, CO₂ có thể có mặt do sự phun CO₂ vào trong bể chứa hydrocarbon như một phần của quy trình thu hồi dầu tăng cường. Do đó, có thể có lợi để giảm hoặc tối thiểu hóa hàm lượng CO₂ trong nguồn cấp khí tự nhiên. Nên lưu ý rằng khí tự nhiên thường chứa một phần đáng kể metan, cùng với các hydrocarbon nhỏ (C₂ - C₄) khác. Do đó, các kỹ thuật được mô tả ở đây về việc phân tách CO₂ ra khỏi khí tự nhiên cũng có thể phù hợp một cách tổng quát hơn với việc phân tách nitơ ra khỏi metan, etan, và các hợp chất hữu cơ khác chứa ba hoặc nhiều hơn ba nguyên tử nặng. Các kỹ thuật này cũng có thể phù hợp cho sự phân tách CO₂ ra khỏi etylen và/hoặc acetylen, dù độ chọn lọc có thể khác so với độ chọn lọc đối với các ankan hoặc rượu.

CO₂ có thể được phân tách ra khỏi khí tự nhiên (hoặc các dòng khác chứa các ankan/hợp chất hữu cơ) sử dụng chất hấp phụ và/hoặc màng mà bao gồm zeolit ITQ-55. Việc hấp phụ có thể được thực hiện sử dụng loại quy trình phù hợp, như quy trình hấp phụ dao động. Đối với sự phân tách bằng cách hấp phụ, khí tự nhiên (hoặc dòng khác chứa các ankan/hợp chất hữu cơ) cũng chứa CO₂ có thể được tiếp xúc với cấu trúc chất hấp phụ. Bề mặt cấu trúc chất hấp phụ có thể bao gồm và/hoặc chứa zeolit ITQ-55 theo cách sao cho các chất lưu đi vào cấu trúc chất hấp phụ có thể đi vào bằng cách đi qua các lỗ của ITQ-55. Phụ thuộc vào cấu trúc chất hấp phụ, các khuyết tật trong cấu trúc tinh thể ITQ-55 và/hoặc các khuyết tật giữa các tinh thể có thể cho phép một số chất lưu đi vào cấu trúc chất hấp phụ mà không đi qua ITQ-55. Do các khuyết tật này, ít hơn 100% chất lưu đi vào cấu trúc chất hấp phụ có thể đi qua các tinh thể ITQ-55, như ít nhất là khoảng 90% thể tích, hoặc ít nhất là khoảng 95%, hoặc ít nhất là khoảng 98%.

Tương tự, với việc phân tách bằng cách thẩm qua màng, khí tự nhiên (hoặc dòng khác chứa các ankan/hợp chất hữu cơ) cũng chứa CO₂ có thể được tiếp xúc với cấu trúc màng. Bề mặt cấu trúc màng có thể bao gồm và/hoặc chứa zeolit ITQ-55 theo

cách sao cho các chất lưu đi vào cấu trúc màng có thể đi vào bằng cách đi qua các lỗ của ITQ-55. Phụ thuộc vào cấu trúc chất hấp phụ, các khuyết tật trong cấu trúc tinh thể ITQ-55 và/hoặc các khuyết tật giữa các tinh thể có thể cho phép một số chất lưu đi vào cấu trúc màng mà không đi qua ITQ-55. Do các khuyết tật này, ít hơn 100% chất lưu đi vào cấu trúc màng có thể đi qua các tinh thể ITQ-55, như ít nhất là khoảng 90% thể tích, hoặc ít nhất là khoảng 95%, hoặc ít nhất là khoảng 98%.

Trong suốt quy trình phân tách, chất lưu bao gồm khí tự nhiên (hoặc hydrocarbon hoặc các thành phần hữu cơ khác) và CO_2 có thể được tiếp xúc với cấu trúc chất hấp phụ hoặc màng. Dựa trên đường kính động học và/hoặc ái lực của nitơ đối với ITQ-55, CO_2 có thể ưu tiên đi vào cấu trúc chất hấp phụ hoặc màng so với metan hoặc các hợp chất hữu cơ khác. Điều này có thể cho phép độ chọn lọc với CO_2 trên metan hoặc hợp chất hữu cơ khác, đối với sự hấp phụ hoặc phân tách qua màng, ít nhất là khoảng 5, hoặc ít nhất là khoảng 10, hoặc ít nhất là khoảng 20, hoặc ít nhất là khoảng 30.

Một cách tùy ý, sự phân tách bằng hấp phụ hoặc bằng màng có thể được thực hiện ở nhiệt độ dưới 300K (26,85°C), như thấp hơn hoặc bằng 275K (1,85°C), hoặc thấp hơn hoặc bằng 250K (-23,85°C), hoặc thấp hơn hoặc bằng 225K (-48,85°C), hoặc thấp hơn hoặc bằng 200K (-73,15°C). Việc này có thể tăng cường độ chọn lọc của ITQ-55 để thực hiện sự phân tách, cũng như có khả năng tăng khả năng giữ CO_2 của cấu trúc chất hấp phụ. Một cách tùy ý, việc thực hiện sự phân tách ở nhiệt độ thấp có thể cũng có lợi từ việc cho phép nước ngưng tụ khỏi chất lưu trước khi chất lưu được tiếp xúc với cấu trúc chất hấp phụ hoặc màng. Một cách tùy ý, sự phân tách nhiệt độ thấp có thể thực hiện ở áp suất phù hợp bất kỳ, như áp suất nhỏ hơn hoặc bằng 1000bar (100MPa). Nên lưu ý rằng ở các điều kiện phân tách này, chất lưu được phân tách có thể tương ứng một cách tùy ý với chất lỏng.

Theo tùy chọn khác, sự phân tách có thể được thực hiện ở nhiệt độ khoảng 270K (-3,15°C) đến khoảng 375K (101,85°C) và ở áp suất nhỏ hơn hoặc bằng khoảng 700bar (70MPa), hoặc nhỏ hơn hoặc bằng khoảng 500bar (50MPa), hoặc nhỏ hơn hoặc bằng khoảng 300bar (30MPa), hoặc nhỏ hơn hoặc bằng khoảng 100bar (10MPa). Dưới các điều kiện này, sự xâm nhập của metan hoặc các hợp chất hữu cơ khác có thể bị giảm, tối thiểu hóa, hoặc có thể bị loại bỏ. Việc tối thiểu hóa sự xâm nhập của

metan hoặc các hợp chất hữu cơ khác vào trong cấu trúc chất hấp phụ hoặc cấu trúc màng có thể tạo điều kiện thuận lợi cho việc thực hiện sự phân tách với độ chọn lọc cao.

Theo tùy chọn khác nữa, sự phân tách có thể được thực hiện ở nhiệt độ lớn hơn khoảng 270K (-3,15°C), hoặc lớn hơn khoảng 325K (51,85°C), hoặc lớn hơn khoảng 375K (101,85°C), như lên đến khoảng 600K (326,85°C) hoặc lớn hơn. Ngoài ra hoặc theo cách khác, sự phân tách có thể được thực hiện ở áp suất lớn hơn khoảng 100bar (10MPa), hoặc lớn hơn khoảng 300bar (30MPa), hoặc lớn hơn khoảng 500bar (50MPa), hoặc lớn hơn khoảng 700bar (70MPa), như lên đến khoảng 1500bar (150MPa) hoặc lớn hơn. Ngoài ra hoặc theo cách khác, sự phân tách có thể được thực hiện ở bất kỳ tổ hợp của khoảng nhiệt độ và áp suất nào được nêu trong đoạn này. Dưới các điều kiện này, một số metan hoặc hợp chất hữu cơ khác có thể có khả năng đi vào cấu trúc chất hấp phụ hoặc cấu trúc màng, nhưng sự phân tách có thể được thực hiện với độ chọn lọc như được mô tả ở trên.

Ví dụ dự đoán 3. Phân tách khí tổng hợp

Sau đây là ví dụ dự đoán. Khí tổng hợp thường đề cập đến hỗn hợp khí chứa tổ hợp của H_2 , CO, CO_2 , và H_2O . Một cách tùy ý, khí tổng hợp đôi khi có thể đề cập đến ít nhất hai trong số H_2 , CO, CO_2 , và H_2O , hoặc ít nhất ba trong số H_2 , CO, CO_2 , và H_2O . Một cách tùy ý, dòng khí tổng hợp cũng có thể chứa một hoặc nhiều thành phần khác, như N_2 , CH_4 , O_2 , và hoặc các hydrocarbon nhỏ khác. Đối với ít nhất một số việc sử dụng của khí tổng hợp, có thể có lợi để giảm hoặc tối thiểu hóa hàm lượng các thành phần khác ngoài H_2 , CO, CO_2 , và H_2O . Ngoài ra hoặc theo cách khác, theo một số khía cạnh, có thể có lợi để phân tách một hoặc nhiều thành phần khí tổng hợp ra khỏi phần còn lại của dòng khí tổng hợp. Ví dụ, có thể mong muốn phân tách hydro ra khỏi khí tổng hợp để sử dụng như nhiên liệu, hoặc để phân tách CO_2 ra khỏi khí tổng hợp sao cho CO_2 có thể được sử dụng và/hoặc được để riêng ra.

Hydro có thể được phân tách ra khỏi khí tổng hợp (và một cách tùy ý, ra khỏi các thành phần khác có mặt trong dòng khí tổng hợp như N_2 hoặc CH_4) sử dụng chất hấp phụ hoặc màng bao gồm zeolit ITQ-55. Việc hấp phụ có thể được thực hiện sử dụng loại quy trình phù hợp bất kỳ, như quy trình hấp phụ dao động. Đối với sự phân tách bằng cách hấp phụ, dòng khí tổng hợp có thể được tiếp xúc với cấu trúc chất hấp

phụ. Bề mặt cấu trúc chất hấp phụ có thể bao gồm và/hoặc chứa zeolit ITQ-55 theo cách sao cho các chất lưu đi vào cấu trúc chất hấp phụ có thể đi vào bằng cách đi qua các lỗ của ITQ-55. Phụ thuộc vào cấu trúc chất hấp phụ, các khuyết tật trong cấu trúc tinh thể ITQ-55 và/hoặc các khuyết tật giữa các tinh thể có thể cho phép một số chất lưu đi vào cấu trúc chất hấp phụ mà không đi qua ITQ-55. Do các khuyết tật này, ít hơn 100% chất lưu đi vào cấu trúc chất hấp phụ có thể đi qua các tinh thể ITQ-55, như ít nhất là khoảng 90 % thể tích, hoặc ít nhất là khoảng 95%, hoặc ít nhất là khoảng 98%.

Tương tự, với việc phân tách hydro bằng cách thấm qua màng, dòng khí tổng hợp có thể được tiếp xúc với cấu trúc màng. Bề mặt cấu trúc màng có thể bao gồm và/hoặc chứa zeolit ITQ-55 theo cách sao cho các chất lưu đi vào cấu trúc màng có thể đi vào bằng cách đi qua các lỗ của ITQ-55. Phụ thuộc vào cấu trúc chất hấp phụ, các khuyết tật trong cấu trúc tinh thể ITQ-55 và/hoặc các khuyết tật giữa các tinh thể có thể cho phép một số chất lưu đi vào cấu trúc màng mà không đi qua ITQ-55. Do các khuyết tật này, ít hơn 100% chất lưu đi vào cấu trúc màng có thể đi qua các tinh thể ITQ-55, như ít nhất là khoảng 90 % thể tích, hoặc ít nhất là khoảng 95%, hoặc ít nhất là khoảng 98%.

Trong suốt quy trình phân tách, chất lưu bao gồm khí tổng hợp có thể được tiếp xúc với cấu trúc chất hấp phụ hoặc màng. Dựa trên đường kính động học hoặc ái lực của hydro đối với ITQ-55, hydro có thể ưu tiên đi vào cấu trúc chất hấp phụ hoặc màng so với các thành phần khác của khí tổng hợp. Điều này có thể cho phép độ chọn lọc của hydro trên các thành phần khí tổng hợp khác, đối với sự hấp phụ hoặc phân tách qua màng, bằng ít nhất là khoảng 5, hoặc ít nhất là khoảng 10, hoặc ít nhất là khoảng 20, hoặc ít nhất là khoảng 30.

Tùy chọn khác có thể là để phân tách CO₂ ra khỏi khí tổng hợp sử dụng chất hấp phụ và/hoặc màng mà bao gồm zeolit ITQ-55. So với các thành phần khí tổng hợp, CO₂ có thể là thành phần được ưu tiên không bị hấp phụ, do đó sản phẩm có nồng độ CO₂ tăng có thể là một phần của dòng mà không bị hấp phụ. Việc hấp phụ có thể được thực hiện sử dụng loại quy trình phù hợp bất kỳ, như quy trình hấp phụ dao động. Đối với sự phân tách bằng cách hấp phụ, dòng khí tổng hợp có thể được tiếp xúc với cấu trúc chất hấp phụ. Bề mặt cấu trúc chất hấp phụ có thể bao gồm và/hoặc chứa zeolit

ITQ-55 theo cách sao cho các chất lưu đi vào cấu trúc chất hấp phụ có thể đi vào bằng cách đi qua các lỗ của ITQ-55. Phụ thuộc vào cấu trúc chất hấp phụ, các khuyết tật trong cấu trúc tinh thể ITQ-55 và/hoặc các khuyết tật giữa các tinh thể có thể cho phép một số chất lưu đi vào cấu trúc chất hấp phụ mà không đi qua ITQ-55. Do các khuyết tật này, ít hơn 100% chất lưu đi vào cấu trúc chất hấp phụ có thể đi qua các tinh thể ITQ-55, như ít nhất là khoảng 90% thể tích, hoặc ít nhất là khoảng 95%, hoặc ít nhất là khoảng 98%.

Tương tự, để phân tách CO₂ sử dụng màng, dòng khí tổng hợp có thể được tiếp xúc với cấu trúc màng. Vì các thành phần khí tổng hợp khác có thể ưu tiên đi vào màng bao gồm ITQ-55, dòng được làm giàu CO₂ có thể tương ứng với phần giữ lại của quá trình phân tách bằng màng. Bề mặt cấu trúc màng có thể bao gồm và/hoặc chứa zeolit ITQ-55 theo cách sao cho các chất lưu đi vào cấu trúc màng có thể đi vào bằng cách đi qua các lỗ của ITQ-55. Phụ thuộc vào cấu trúc chất hấp phụ, các khuyết tật trong cấu trúc tinh thể ITQ-55 và/hoặc các khuyết tật giữa các tinh thể có thể cho phép một số chất lưu đi vào cấu trúc màng mà không đi qua ITQ-55. Do các khuyết tật này, ít hơn 100% chất lưu đi vào cấu trúc màng có thể đi qua các tinh thể ITQ-55, như ít nhất là khoảng 90% thể tích, hoặc ít nhất là khoảng 95%, hoặc ít nhất là khoảng 98%.

Trong suốt quy trình phân tách, chất lưu bao gồm khí tổng hợp có thể được tiếp xúc với cấu trúc chất hấp phụ hoặc màng. Dựa trên đường kính động học và/hoặc ái lực của CO₂ đối với ITQ-55 so với các thành phần khí tổng hợp khác, CO₂ có thể ưu tiên không đi vào cấu trúc chất hấp phụ hoặc màng so với các thành phần khác của khí tổng hợp. Điều này có thể cho phép độ chọn lọc đối với CO₂ trên các thành phần khí tổng hợp khác, đối với sự hấp phụ hoặc phân tách qua màng, bằng ít nhất là khoảng 5, hoặc ít nhất là khoảng 10, hoặc ít nhất là khoảng 20, hoặc ít nhất là khoảng 30. Nên lưu ý rằng dòng khí tổng hợp mà chứa thêm các thành phần không phải khí tổng hợp khác, như N₂ hoặc CH₄, có thể có lợi từ hai bước phân tách. Bước thứ nhất có thể phân tách CO₂, N₂, và CH₄ ra khỏi các thành phần khí tổng hợp còn lại dưới dạng dòng không được hấp phụ hoặc dòng giữ lại. Sự phân tách thứ hai sau đó có thể tận dụng ưu điểm của ái lực tăng của CO₂ đối với ITQ-55 so với N₂ và/hoặc CH₄ để tạo thành dòng được hấp phụ được làm giàu hoặc dòng thấm qua.

Một cách tùy ý, sự phân tách bằng hấp phụ hoặc bằng màng có thể được thực hiện ở nhiệt độ dưới 300K (26,85°C), như thấp hơn hoặc bằng 275K (1,85°C), hoặc thấp hơn hoặc bằng 250K (-23,15°C), hoặc thấp hơn hoặc bằng 225K (-48,15°C), hoặc thấp hơn hoặc bằng 200K (-73,85°C). Việc này có thể tăng cường độ chọn lọc của ITQ-55 để thực hiện sự phân tách, cũng như có khả năng tăng khả năng giữ hydro và/hoặc CO₂ của cấu trúc chất hấp phụ. Một cách tùy ý, việc thực hiện sự phân tách ở nhiệt độ thấp có thể cũng có lợi từ việc cho phép nước ngưng tụ khỏi chất lưu trước khi chất lưu được tiếp xúc với cấu trúc chất hấp phụ hoặc màng. Một cách tùy ý, sự phân tách nhiệt độ thấp có thể được thực hiện ở áp suất phù hợp bất kỳ, như áp suất nhỏ hơn hoặc bằng 1000 bar (100 MPa). Nên lưu ý rằng ở các điều kiện phân tách này, chất lưu được phân tách có thể tương ứng một cách tùy ý với chất lỏng.

Theo tùy chọn khác, sự phân tách có thể được thực hiện ở nhiệt độ khoảng 270K (-3,15°C) đến khoảng 375K (101,85°C), và áp suất nhỏ hơn hoặc bằng khoảng 700bar (70MPa), hoặc nhỏ hơn hoặc bằng khoảng 500bar (50MPa), hoặc nhỏ hơn hoặc bằng khoảng 300bar (30MPa), hoặc nhỏ hơn hoặc bằng khoảng 100bar (10MPa). Dưới các điều kiện này, sự xâm nhập của metan hoặc các hợp chất hữu cơ khác có thể bị giảm, tối thiểu hóa, hoặc có thể bị loại bỏ. Việc tối thiểu sự hóa xâm nhập của metan hoặc các hợp chất hữu cơ khác vào cấu trúc chất hấp phụ hoặc cấu trúc màng có thể tạo điều kiện thuận lợi cho việc thực hiện sự phân tách với độ chọn lọc cao.

Theo tùy chọn khác nữa, sự phân tách có thể được thực hiện ở nhiệt độ lớn hơn khoảng 270K (-3,15°C), hoặc lớn hơn khoảng 325K (51,85°C), hoặc lớn hơn khoảng 375K (101,85°C), như lên đến khoảng 600K (326,85°C) hoặc lớn hơn. Ngoài ra hoặc theo cách khác, sự phân tách có thể được thực hiện ở áp suất lớn hơn khoảng 100bar (10MPa), hoặc lớn hơn khoảng 300bar (30MPa), hoặc lớn hơn khoảng 500bar (50MPa), hoặc lớn hơn khoảng 700bar (70MPa), như lên đến khoảng 1500bar (150MPa) hoặc lớn hơn. Ngoài ra hoặc theo cách khác, sự phân tách có thể được thực hiện ở tổ hợp bất kỳ khoảng nhiệt độ và áp suất nào được nêu trong đoạn này. Dưới các điều kiện này, một số metan hoặc hợp chất hữu cơ khác có thể có khả năng đi vào cấu trúc chất hấp phụ hoặc cấu trúc màng, nhưng sự phân tách có thể được thực hiện với độ chọn lọc như được mô tả ở trên.

Ví dụ dự đoán 4 Phân tách O₂ ra khỏi N₂

Sau đây là ví dụ dự đoán. Loại phân tách quan trọng về mặt thương mại là phân tách O_2 ra khỏi N_2 . Trong khi không khí có thể được sử dụng như dòng cấp cho một số phản ứng, trong nhiều tình huống có thể mong muốn có dòng được làm giàu hoặc được làm nghèo oxy so với không khí. Ngoài phân tách oxy ra khỏi nitơ với dòng không khí bắt đầu, các quá trình phân tách này có thể thường được thực hiện trên các dòng khác chứa cả oxy và nitơ.

Nitơ có thể được phân tách ra khỏi oxy sử dụng chất hấp phụ và/hoặc màng mà bao gồm zeolit ITQ-55. Việc hấp phụ có thể được thực hiện sử dụng loại quy trình phù hợp bất kỳ, như quy trình hấp phụ dao động. Đối với việc phân tách bằng cách hấp phụ, dòng chứa nitơ và oxy có thể được tiếp xúc với cấu trúc chất hấp phụ. Oxy thường có thể có đường kính động học nhỏ hơn và/hoặc ái lực cao hơn với ITQ-55, vì vậy tin tưởng rằng oxy có thể ưu tiên đi vào cấu trúc lỗ của zeolit ITQ-55. Bề mặt cấu trúc chất hấp phụ có thể bao gồm và/hoặc chứa zeolit ITQ-55 theo cách sao cho các chất lưu đi vào cấu trúc chất hấp phụ có thể đi vào bằng cách đi qua các lỗ của ITQ-55. Phụ thuộc vào cấu trúc chất hấp phụ, các khuyết tật trong cấu trúc tinh thể ITQ-55 và/hoặc các khuyết tật giữa các tinh thể có thể cho phép một số chất lưu đi vào cấu trúc chất hấp phụ mà không đi qua ITQ-55. Do các khuyết tật này, ít hơn 100% chất lưu đi vào cấu trúc chất hấp phụ có thể đi qua các tinh thể ITQ-55, như ít nhất là khoảng 90 % thể tích, hoặc ít nhất là khoảng 95%, hoặc ít nhất là khoảng 98%.

Tương tự, đối với việc phân tách bằng cách thẩm qua màng, dòng chứa nitơ và oxy có thể được tiếp xúc với cấu trúc màng. Bề mặt cấu trúc màng có thể bao gồm và/hoặc chứa zeolit ITQ-55 theo cách sao cho các chất lưu đi vào cấu trúc màng có thể đi vào bằng cách đi qua các lỗ của ITQ-55. Phụ thuộc vào cấu trúc chất hấp phụ, các khuyết tật trong cấu trúc tinh thể ITQ-55 và/hoặc các khuyết tật giữa các tinh thể có thể cho phép một số chất lưu đi vào cấu trúc màng mà không đi qua ITQ-55. Do các khuyết tật này, ít hơn 100% chất lưu đi vào cấu trúc màng có thể đi qua các tinh thể ITQ-55, như ít nhất là khoảng 90% thể tích, hoặc ít nhất là khoảng 95%, hoặc ít nhất là khoảng 98%.

Trong suốt quy trình phân tách, chất lưu bao gồm oxy và nitơ có thể được tiếp xúc với cấu trúc chất hấp phụ hoặc màng. Dựa trên đường kính động học tương đối và/hoặc ái lực tương đối của oxy và nitơ so với ITQ-55, tin rằng oxy có thể ưu tiên đi

vào cấu trúc chất hấp phụ hoặc màng so với nitơ. Điều này có thể cho phép độ chọn lọc đối với oxy hoặc nitơ (phụ thuộc vào dòng sản phẩm tương ứng với đầu ra mong muốn), đối với sự hấp phụ hoặc phân tách qua màng, bằng ít nhất là khoảng 5, hoặc ít nhất là khoảng 10, hoặc ít nhất là khoảng 20, hoặc ít nhất là khoảng 30.

Một cách tùy ý, việc phân tách bằng hấp phụ hoặc bằng màng có thể được thực hiện ở nhiệt độ dưới 300K (26,85°C), như thấp hơn hoặc bằng 275K (1,85°C), hoặc thấp hơn hoặc bằng 250K (-23,15°C), hoặc thấp hơn hoặc bằng 225K (-48,15°C), hoặc thấp hơn hoặc bằng 200K (-73,85°C). Điều này có thể tăng cường độ chọn lọc của ITQ-55 để thực hiện việc phân tách, có khả năng tăng khả năng giữ nitơ của cấu trúc chất hấp phụ. Một cách tùy ý, việc thực hiện phân tách ở nhiệt độ thấp có thể cũng có lợi từ việc cho phép nước ngưng tụ khỏi chất lưu trước khi chất lưu được tiếp xúc với cấu trúc chất hấp phụ hoặc màng. Một cách tùy ý, phân tách ở nhiệt độ thấp có thể thực hiện ở áp suất phù hợp bất kỳ, như áp suất nhỏ hơn hoặc bằng 1000bar (100MPa). Nên lưu ý rằng ở các điều kiện phân tách này, chất lưu được phân tách có thể tương ứng một cách tùy ý với chất lỏng.

Theo tùy chọn khác, sự phân tách có thể được thực hiện ở nhiệt độ khoảng 270K (-3,15°C) đến khoảng 375K (101,85°C) và tại áp suất nhỏ hơn hoặc bằng khoảng 700bar (70MPa), hoặc nhỏ hơn hoặc bằng khoảng 500bar (50MPa), hoặc nhỏ hơn hoặc bằng khoảng 300bar (30MPa), hoặc nhỏ hơn hoặc bằng khoảng 100bar (10MPa). Dưới các điều kiện này, sự xâm nhập của metan hoặc các hợp chất hữu cơ khác có thể bị giảm, tối thiểu hóa, hoặc có thể bị loại bỏ. Việc tối thiểu hóa sự xâm nhập của metan hoặc các hợp chất hữu cơ khác vào cấu trúc chất hấp phụ hoặc cấu trúc màng có thể tạo điều kiện thuận lợi cho việc thực hiện sự phân tách với độ chọn lọc cao.

Theo tùy chọn khác nữa, việc phân tách có thể được thực hiện ở nhiệt độ lớn hơn khoảng 270K (-3,15°C), hoặc lớn hơn khoảng 325K (51,85°C), hoặc lớn hơn khoảng 375K (101,85°C), như lên đến khoảng 600K (326,85°C) hoặc lớn hơn. Ngoài ra hoặc theo cách khác, sự phân tách có thể được thực hiện ở áp suất lớn hơn khoảng 100bar (10MPa), hoặc lớn hơn khoảng 300bar (30MPa), hoặc lớn hơn khoảng 500bar (50MPa), hoặc lớn hơn khoảng 700bar (70MPa), như lên đến khoảng 1500bar (150MPa) hoặc lớn hơn. Ngoài ra hoặc theo cách khác, sự phân tách có thể được thực hiện ở tổ hợp khoảng nhiệt độ và áp suất bất kỳ nào được nêu trong đoạn này. Dưới

các điều kiện này, một số metan hoặc hợp chất hữu cơ khác có thể có khả năng đi vào cấu trúc chất hấp phụ hoặc cấu trúc màng, nhưng sự phân tách có thể được thực hiện với độ chọn lọc như được mô tả ở trên.

Ví dụ dự đoán 5. Lưu trữ các hydrocarbon và/hoặc các hợp chất hữu cơ nhỏ

Sau đây là ví dụ dự đoán. Dù quy trình lưu trữ các hydrocarbon có thể được bắt đầu bằng cách sử dụng dòng chứa nhiều thành phần, để làm rõ phần mô tả này, ví dụ dự đoán này dựa trên việc thực hiện lưu trữ dựa trên dòng thành phần đơn.

Theo một số khía cạnh, việc lưu trữ hydrocarbon trong cấu trúc chất hấp phụ bao gồm ITQ-55 có thể được thực hiện bằng cách ban đầu hấp phụ ITQ-55 tại nhiệt độ và áp suất được nâng cao. Các hợp chất phù hợp để lưu trữ có thể bao gồm, nhưng không giới hạn ở, metan, etan, etylen, formandehyt, metanol, dimetyl ete, và các tổ hợp của chúng.

Trong suốt bước hấp phụ ban đầu, thành phần chất lưu có thể được hấp phụ vào trong cấu trúc chất hấp phụ. Các điều kiện trong suốt quá trình hấp phụ có thể bao gồm, ví dụ, a) nhiệt độ ít nhất là khoảng 325K (51,85°C), hoặc ít nhất là khoảng 375K (101,85°C), hoặc ít nhất là khoảng 425K (151,85°C), hoặc ít nhất là khoảng 475K (201,85°C); b) áp suất ít nhất là khoảng 100bar (10MPa), hoặc ít nhất là khoảng 300bar (30MPa), hoặc ít nhất là khoảng 500bar (50MPa), hoặc ít nhất là khoảng 700bar (70MPa); hoặc c) tổ hợp của chúng. Không bị ràng buộc bởi bất kỳ lý thuyết cụ thể nào, nhiệt độ và/hoặc áp suất được nâng cao có thể cho phép đưa lượng tải tăng cao của thành phần hữu cơ vào trong cấu trúc chất hấp phụ.

Sau quá trình tải của cấu trúc chất hấp phụ, nhiệt độ và/hoặc áp suất có thể giảm. Trong các khía cạnh trong đó việc tải của cấu trúc chất hấp phụ được thực hiện tại áp suất được nâng cao, áp suất có thể giảm xuống khoảng thấp hơn hoặc bằng 100bar (10MPa), hoặc khoảng thấp hơn hoặc bằng 10bar (1MPa), hoặc khoảng thấp hơn hoặc bằng 2bar (0,2MPa), hoặc khoảng thấp hơn hoặc bằng 1bar (0,1MPa). Trong các khía cạnh trong đó việc tải của cấu trúc chất hấp phụ được thực hiện ở nhiệt độ được nâng cao, nhiệt độ có thể giảm đến khoảng thấp hơn hoặc bằng 325K (51,85°C), hoặc khoảng thấp hơn hoặc bằng 300K (26,85°C), hoặc khoảng thấp hơn hoặc bằng 275K (1,85°C), hoặc khoảng thấp hơn hoặc bằng 250K (-23,15°C), hoặc khoảng thấp hơn hoặc bằng 225K (-48,15°C), hoặc khoảng thấp hơn hoặc bằng 200K (-73,15°C).

Trong các khía cạnh trong đó nhiệt độ và áp suất được nâng cao trong suốt quá trình tải, nhiệt độ có thể được giảm một cách tùy ý trước và sau đó áp suất có thể được giảm. Sau khi giảm nhiệt độ và/hoặc áp suất, một số quá trình giải hấp phụ của các thành phần được hấp phụ có thể xảy ra. Tuy nhiên, dựa trên các điều kiện nhiệt độ và/hoặc áp suất giảm, một phần của thành phần có thể vẫn bị giữ lại do động lực trong cấu trúc chất hấp phụ. Điều này có thể cho phép cấu trúc chất hấp phụ giữ lại một lượng thành phần chất lưu bên trong cấu trúc chất hấp phụ, mặc dù không khí bên ngoài của chất hấp phụ có thể không chứa thành phần được hấp phụ nữa. Tải được giữ lại trong chất hấp phụ có thể tương ứng với phần trăm tải mà đạt được trong suốt quá trình hấp phụ, như ít nhất là khoảng 10% trọng lượng của tải trong suốt quá trình hấp phụ, hoặc ít nhất là khoảng 20% trọng lượng, hoặc ít nhất là khoảng 30% trọng lượng, hoặc ít nhất là khoảng 40% trọng lượng, hoặc ít nhất là khoảng 50%, hoặc ít nhất là khoảng 60% trọng lượng. Cấu trúc chất hấp phụ sau đó có thể được chuyển một cách tùy ý dưới các điều kiện nhiệt độ và/hoặc áp suất giảm.

Sau khi lưu trữ một khoảng thời gian mong muốn, nhiệt độ có thể tăng để cho phép thành phần được hấp phụ đi ra khỏi cấu trúc chất hấp phụ. Điều này cho phép thành phần được hấp phụ, tương ứng với nhiên liệu và/hoặc chất phản ứng tiềm năng, được lưu trữ và vận chuyển một cách tùy ý dưới các điều kiện ít khắc nghiệt hơn. Nói cách khác, nhiệt độ và/hoặc áp suất yêu cầu cho việc lưu trữ thành phần được hấp phụ trong cấu trúc chất hấp phụ có thể giảm so với các điều kiện được yêu cầu để lưu trữ thành phần được hấp phụ trong trường hợp không có cấu trúc chất hấp phụ.

Các phương án phân tách bổ sung

Phương án 1. Phương pháp phân tách các chất lưu, bao gồm: cho dòng chất lưu đầu vào chứa thành phần chất lưu thứ nhất và thành phần chất lưu thứ hai tiếp xúc với chất hấp phụ chứa zeolit ITQ-55 để tạo thành dòng chất lưu sản phẩm loại bỏ, tỷ số mol của thành phần chất lưu thứ nhất trên thành phần chất lưu thứ hai trong dòng chất lưu sản phẩm loại bỏ ít hơn tỷ số mol của thành phần chất lưu thứ nhất trên thành phần chất lưu thứ hai trong dòng chất lưu đầu vào; gom dòng chất lưu sản phẩm loại bỏ; tạo dòng chất lưu sản phẩm được hấp phụ, tỷ số mol của thành phần chất lưu thứ nhất trên thành phần chất lưu thứ hai trong dòng sản phẩm được hấp phụ lớn hơn tỷ số mol của thành phần chất lưu thứ nhất trên thành phần chất lưu thứ hai trong dòng chất lưu đầu

vào; và gom dòng sản phẩm được hấp phụ, trong đó zeolit ITQ-55 có khung là các nguyên tử tứ diện (tetrahedral - T) được nối bởi các nguyên tử cầu nối, trong đó nguyên tử tứ diện được xác định bằng cách nối các nguyên tử T gần nhất theo cách được mô tả trong bảng sau:

Các liên kết nguyên tử tứ diện ITQ-55

Nguyên tử T	Được nối với:
T1	T6, T7, T55, T73
T2	T3, T5, T9, T56
T3	T2, T7, T21, T27
T4	T8, T9, T58, T73
T5	T2, T8, T52, T59
T6	T1, T8, T53, T60
T7	T1, T3, T50, T61
T8	T4, T5, T6, T51
T9	T2, T4, T21, T63
T10	T15, T16, T64, T74
T11	T12, T14, T18, T65
T12	T11, T16, T30, T36
T13	T17, T18, T67, T74
T14	T11, T17, T43, T68
T15	T10, T17, T44, T69
T16	T10, T12, T41, T70
T17	T13, T14, T15, T42
T18	T11, T13, T30, T72
T19	T24, T25, T37, T73
T20	T21, T23, T27, T38
T21	T3, T9, T20, T25
T22	T26, T27, T40, T73
T23	T20, T26, T41, T70
T24	T19, T26, T42, T71
T25	T19, T21, T43, T68
T26	T22, T23, T24, T69
T27	T3, T20, T22, T45
T28	T33, T34, T46, T74
T29	T30, T32, T36, T47
T30	T12, T18, T29, T34
T31	T35, T36, T49, T74
T32	T29, T35, T50, T61
T33	T28, T35, T51, T62
T34	T28, T30, T52, T59
T35	T31, T32, T33, T60
T36	T12, T29, T31, T54
T37	T19, T42, T43, T75

T38	T20, T39, T41, T45
T39	T38, T43, T57, T63
T40	T22, T44, T45, T75
T41	T16, T23, T38, T44
T42	T17, T24, T37, T44
T43	T14, T25, T37, T39
T44	T15, T40, T41, T42
T45	T27, T38, T40, T57
T46	T28, T51, T52, T76
T47	T29, T48, T50, T54
T48	T47, T52, T66, T72
T49	T31, T53, T54, T76
T50	T7, T32, T47, T53
T51	T8, T33, T46, T53
T52	T5, T34, T46, T48
T53	T6, T49, T50, T51
T54	T36, T47, T49, T66
T55	T1, T60, T61, T75
T56	T2, T57, T59, T63
T57	T39, T45, T56, T61
T58	T4, T62, T63, T75
T59	T5, T34, T56, T62
T60	T6, T35, T55, T62
T61	T7, T32, T55, T57
T62	T33, T58, T59, T60
T63	T9, T39, T56, T58
T64	T10, T69, T70, T76
T65	T11, T66, T68, T72
T66	T48, T54, T65, T70
T67	T13, T71, T72, T76
T68	T14, T25, T65, T71
T69	T15, T26, T64, T71
T70	T16, T23, T64, T66
T71	T24, T67, T68, T69
T72	T18, T48, T65, T67
T73	T1, T4, T19, T22
T74	T10, T13, T28, T31
T75	T37, T40, T55, T58
T76	T46, T49, T64, T67.

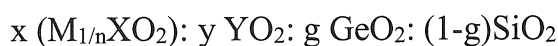
Phương án 2. Phương pháp phân tách các chất lưu, bao gồm: cho dòng chất lưu đầu vào chứa thành phần chất lưu thứ nhất và thành phần chất lưu thứ hai tiếp xúc với chất hấp phụ chứa zeolit ITQ-55 để tạo thành dòng chất lưu sản phẩm loại bỏ, tỷ số mol của thành phần chất lưu thứ nhất trên thành phần chất lưu thứ hai trong dòng chất

lưu sản phẩm loại bỏ ít hơn tỷ số mol của thành phần chất lưu thứ nhất trên thành phần chất lưu thứ hai trong dòng chất lưu đầu vào; gom dòng chất lưu sản phẩm loại bỏ; tạo dòng chất lưu sản phẩm được hấp phụ, tỷ số mol của thành phần chất lưu thứ nhất trên thành phần chất lưu thứ hai trong dòng sản phẩm được hấp phụ lớn hơn tỷ số mol của thành phần chất lưu thứ nhất trên thành phần chất lưu thứ hai trong dòng chất lưu đầu vào; và gom dòng sản phẩm được hấp phụ, trong đó zeolit ITQ-55, như được tổng hợp, có ảnh nhiễu xạ tia X với, ít nhất, các trị số góc 2θ (độ) và các cường độ tương ứng (I/I_0):

2θ (độ) $\pm 0,5$	Cường độ (I/I_0)
5,8	w
7,7	w
8,9	w
9,3	mf
9,9	w
10,1	w
13,2	m
13,4	w
14,7	w
15,1	m
15,4	w
15,5	w
17,4	m
17,7	m
19,9	m
20,6	m
21,2	f
21,6	f
22,0	f
23,1	mf
24,4	m
27,0	m

trong đó I_0 là cường độ từ đỉnh cường độ mạnh nhất được gán trị số 100
 w là cường độ tương đối yếu nằm trong khoảng từ 0 đến 20%,
 m là cường độ tương đối trung bình nằm trong khoảng từ 20 đến 40%,
 f là cường độ tương đối mạnh nằm trong khoảng từ 40 đến 60%,
 và mf là cường độ tương đối cực mạnh nằm trong khoảng từ 60 đến 100%,

Phương án 3. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án trên, trong đó zeolit ITQ-55 có, ở trạng thái được nung khô và không có các khuyết tật trong ma trận tinh thể của nó được biểu thị bởi sự có mặt của các silanol, công thức thực nghiệm



trong đó

M được lựa chọn giữa H^+ , ít nhất một ion dương vô cơ có điện tích $+n$, và hỗn hợp của cả hai,

X là ít nhất một nguyên tố hóa học có trạng thái oxi hóa $+3$,

Y là ít nhất một nguyên tố hóa học có trạng thái oxi hóa $+4$, khác Si ,

x có trị số nằm trong khoảng từ 0 đến 0,2, bao gồm cả 0 và 0,2,

y có trị số nằm trong khoảng từ 0 đến 0,1, bao gồm cả 0 và 0,1,

g có trị số nằm trong khoảng từ 0 đến 0,5, bao gồm cả 0 và 0,5,

Phương án 4. Phương pháp theo phương án 3, trong đó x có trị số về cơ bản bằng 0, y có trị số về cơ bản bằng 0, và g có trị số về cơ bản bằng 0.

Phương án 5. Phương pháp theo phương án 3, trong đó a) x có trị số lớn hơn 0, b) y có trị số lớn hơn 0, c) g có trị số lớn hơn 0, hoặc d) tổ hợp của chúng.

Phương án 6. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án trên, trong đó việc tạo thành dòng chất lưu sản phẩm được hấp phụ bao gồm bước biến đổi ít nhất một trong số nhiệt độ hoặc áp suất của chất hấp phụ.

Phương án 7. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án trên, trong đó việc tạo thành dòng chất lưu sản phẩm được hấp phụ bao gồm bước chodòng chất lưu chứa thành phần thứ ba tiếp xúc với chất hấp phụ chứa zeolit ITQ-55, ít nhất một phần của thành phần thứ ba được hấp phụ bởi chất hấp phụ chứa zeolit ITQ-55.

Phương án 8. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án trên, trong đó bước cho dòng chất lưu đầu vào tiếp xúc với chất hấp phụ bao gồm bước cho dòng chất lưu đầu vào tiếp xúc với chất hấp phụ trong bể hấp phụ dao động.

Phương án 9. Phương pháp theo phương án 8, trong đó bước cho dòng chất lưu đầu vào tiếp xúc với chất hấp phụ bao gồm bước cho dòng chất lưu đầu vào tiếp xúc với chất hấp phụ dưới các điều kiện hấp phụ dao động áp suất, các điều kiện hấp phụ dao động nhiệt độ, các điều kiện hấp phụ dao động áp suất chu kỳ nhanh, hoặc tổ hợp của chúng.

Phương án 10. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án trên, trong đó dòng chất lưu đầu vào được tiếp xúc với chất hấp phụ tại các điều kiện hiệu quả để thực hiện sự phân tách theo động học thành phần thứ nhất ra khỏi thành phần thứ hai, tại các điều kiện hiệu quả để thực hiện sự phân tách cân bằng thành phần thứ nhất ra khỏi thành phần thứ hai hoặc tổ hợp của chúng.

Phương án 11. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án trên, trong đó chất hấp phụ có ít hơn khoảng 20% thể tích lỗ mở trong các lỗ có đường kính lớn hơn khoảng 20 Ångstrom và nhỏ hơn khoảng 1 μm .

Phương án 12. Phương pháp phân tách các chất lưu, bao gồm: cho dòng chất lưu đầu vào chứa thành phần chất lưu thứ nhất và thành phần chất lưu thứ hai tiếp xúc với màng bao gồm các hạt tinh thể zeolit ITQ-55 để tạo thành dòng chất lưu sản phẩm thấm qua và dòng chất lưu sản phẩm loại bỏ, tỷ số mol của thành phần chất lưu thứ nhất trên thành phần chất lưu thứ hai trong dòng chất lưu sản phẩm thấm qua lớn hơn tỷ số của thành phần chất lưu thứ nhất trên thành phần chất lưu thứ hai trong dòng chất lưu đầu vào, tỷ số mol của thành phần chất lưu thứ nhất trên thành phần chất lưu thứ hai trong dòng chất lưu sản phẩm loại bỏ nhỏ hơn tỷ số của thành phần chất lưu thứ nhất trên thành phần chất lưu thứ hai trong dòng chất lưu đầu vào, trong đó nguyên tử tứ diện được xác định bằng cách nối các nguyên tử T gần nhất theo cách được mô tả trong bảng sau:

Các liên kết nguyên tử tứ diện ITQ-55

Nguyên tử T	Được nối với:
T1	T6, T7, T55, T73
T2	T3, T5, T9, T56
T3	T2, T7, T21, T27
T4	T8, T9, T58, T73
T5	T2, T8, T52, T59
T6	T1, T8, T53, T60
T7	T1, T3, T50, T61

T8	T4, T5, T6, T51
T9	T2, T4, T21, T63
T10	T15, T16, T64, T74
T11	T12, T14, T18, T65
T12	T11, T16, T30, T36
T13	T17, T18, T67, T74
T14	T11, T17, T43, T68
T15	T10, T17, T44, T69
T16	T10, T12, T41, T70
T17	T13, T14, T15, T42
T18	T11, T13, T30, T72
T19	T24, T25, T37, T73
T20	T21, T23, T27, T38
T21	T3, T9, T20, T25
T22	T26, T27, T40, T73
T23	T20, T26, T41, T70
T24	T19, T26, T42, T71
T25	T19, T21, T43, T68
T26	T22, T23, T24, T69
T27	T3, T20, T22, T45
T28	T33, T34, T46, T74
T29	T30, T32, T36, T47
T30	T12, T18, T29, T34
T31	T35, T36, T49, T74
T32	T29, T35, T50, T61
T33	T28, T35, T51, T62
T34	T28, T30, T52, T59
T35	T31, T32, T33, T60
T36	T12, T29, T31, T54
T37	T19, T42, T43, T75
T38	T20, T39, T41, T45
T39	T38, T43, T57, T63
T40	T22, T44, T45, T75
T41	T16, T23, T38, T44
T42	T17, T24, T37, T44
T43	T14, T25, T37, T39
T44	T15, T40, T41, T42
T45	T27, T38, T40, T57
T46	T28, T51, T52, T76
T47	T29, T48, T50, T54
T48	T47, T52, T66, T72
T49	T31, T53, T54, T76
T50	T7, T32, T47, T53
T51	T8, T33, T46, T53
T52	T5, T34, T46, T48
T53	T6, T49, T50, T51

T54	T36, T47, T49, T66
T55	T1, T60, T61, T75
T56	T2, T57, T59, T63
T57	T39, T45, T56, T61
T58	T4, T62, T63, T75
T59	T5, T34, T56, T62
T60	T6, T35, T55, T62
T61	T7, T32, T55, T57
T62	T33, T58, T59, T60
T63	T9, T39, T56, T58
T64	T10, T69, T70, T76
T65	T11, T66, T68, T72
T66	T48, T54, T65, T70
T67	T13, T71, T72, T76
T68	T14, T25, T65, T71
T69	T15, T26, T64, T71
T70	T16, T23, T64, T66
T71	T24, T67, T68, T69
T72	T18, T48, T65, T67
T73	T1, T4, T19, T22
T74	T10, T13, T28, T31
T75	T37, T40, T55, T58
T76	T46, T49, T64, T67.

Phương án 13. Phương pháp phân tách các chất lưu, bao gồm: cho dòng chất lưu đầu vào chứa thành phần chất lưu thứ nhất và thành phần chất lưu thứ hai tiếp xúc với màng bao gồm các hạt tinh thể zeolit ITQ-55 để tạo thành dòng chất lưu sản phẩm thấm qua và dòng chất lưu sản phẩm loại bỏ, tỷ số mol của thành phần chất lưu thứ nhất trên thành phần chất lưu thứ hai trong dòng chất lưu sản phẩm thấm qua lớn hơn tỷ số của thành phần chất lưu thứ nhất trên thành phần chất lưu thứ hai trong dòng chất lưu đầu vào, tỷ số mol của thành phần chất lưu thứ nhất trên thành phần chất lưu thứ hai trong dòng chất lưu sản phẩm loại bỏ nhỏ hơn tỷ số của thành phần chất lưu thứ nhất trên thành phần chất lưu thứ hai trong dòng chất lưu đầu vào, trong đó zeolit ITQ-55, như được tổng hợp, có ảnh nhiễu xạ tia X với, ít nhất, các trị số góc 2θ (độ) và các cường độ tương ứng (I/I_0):

2θ (độ) $\pm 0,5$	Cường độ (I/I_0)
5,8	w
7,7	w

8,9	w
9,3	mf
9,9	w
10,1	w
13,2	m
13,4	w
14,7	w
15,1	m
15,4	w
15,5	w
17,4	m
17,7	m
19,9	m
20,6	m
21,2	f
21,6	f
22,0	f
23,1	mf
24,4	m
27,0	m

trong đó I_0 là cường độ từ đỉnh cường độ mạnh nhất được gán trị số 100

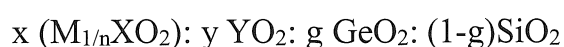
w là cường độ tương đối yếu nằm trong khoảng từ 0 đến 20%,

m là cường độ tương đối trung bình nằm trong khoảng từ 20 đến 40%,

f là cường độ tương đối mạnh nằm trong khoảng từ 40 đến 60%,

và mf là cường độ tương đối cực mạnh nằm trong khoảng từ 60 đến 100%,

Phương án 14. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án 12 hoặc 13, trong đó zeolit ITQ-55 có, ở trạng thái được nung khô và không có các khuyết tật trong ma trận tinh thể của nó được biểu thị bởi sự có mặt của các silanol, công thức thực nghiệm:



trong đó:

M được chọn trong số H^+ , ít nhất một ion dương vô cơ có điện tích $+n$, và hỗn hợp của cả hai,

X là ít nhất một nguyên tố hóa học có trạng thái oxi hóa +3,

Y là ít nhất một nguyên tố hóa học có trạng thái oxi hóa +4, khác Si,

x có trị số nằm trong khoảng từ 0 đến 0,2, bao gồm cả 0 và 0,2,

y có trị số nằm trong khoảng từ 0 đến 0,1, bao gồm cả 0 và 0,1,

g có trị số nằm trong khoảng từ 0 đến 0,5, bao gồm cả 0 và 0,5,

Phương án 15. Phương pháp theo phương án 14, trong đó x có trị số về cơ bản bằng 0, y có trị số về cơ bản bằng 0, và g có trị số về cơ bản bằng 0.

Phương án 16. Phương pháp theo phương án 14, trong đó a) x có trị số lớn hơn 0, b) y có trị số lớn hơn 0, c) g có trị số lớn hơn 0, hoặc d) tổ hợp của chúng.

Phương án 17. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án từ 12 đến 16, trong đó màng bao gồm các hạt tinh thể zeolit ITQ-55 có kích thước hạt trung bình nằm trong khoảng từ khoảng 20nm đến khoảng 1µm.

Phương án 18. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án từ 12 đến 17, trong đó các hạt tinh thể zeolit ITQ-55 bao gồm lớp hạt kề nhau.

Phương án 19. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án từ 12 đến 18, trong đó các hạt tinh thể zeolit ITQ-55 bao gồm lớp hạt tinh thể zeolit ITQ-55 trên giá đỡ.

Phương án 20. Phương pháp theo phương án 19, trong đó giá đỡ bao gồm thủy tinh, thạch anh nóng chảy, silic oxit, silic, đất sét, kim loại, thủy tinh xốp, kim loại xốp được thiêu kết, titan oxit, cordierit, hoặc tổ hợp của chúng.

Phương án 21. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án 19 hoặc 20, trong đó lớp được đỡ của các hạt tinh thể zeolit ITQ-55 bao gồm các hạt tinh thể zeolit ITQ-55 trong ma trận hạt, cấu trúc lỗ được xác định bởi các khe hở giữa các hạt, giữa các tinh thể, và giữa các hạt và các tinh thể.

Phương án 22. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án từ 12 đến 21, trong đó màng bao gồm ít nhất một trong số lớp lai và lớp hỗn hợp.

Phương án 23. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án từ 12 đến 22, còn bao gồm bước cho mặt thấm của màng tiếp xúc với dòng quét.

Phương án 24. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án trên, trong đó thành phần chất lưu thứ hai là metan, etan, metanol, dimetyl ete, hợp chất hữu cơ chứa ba hoặc nhiều hơn ba nguyên tử nặng, hoặc tổ hợp của chúng.

Phương án 25. Phương pháp theo phương án 24, trong đó thành phần chất lưu thứ nhất là CO, CO₂, H₂, H₂O, hoặc tổ hợp của chúng.

Phương án 26. Phương pháp theo phương án 25, trong đó thành phần chất lưu thứ nhất là CO₂ và thành phần chất lưu thứ hai là CH₄.

Phương án 27. Phương pháp theo phương án 26, trong đó dòng chất lưu đầu vào bao gồm khí tự nhiên.

Phương án 28. Phương pháp theo phương án 24, trong đó thành phần chất lưu thứ nhất là etylen, acetylen, formandehyt, hoặc tổ hợp của chúng.

Phương án 29. Phương pháp theo phương án 24, trong đó thành phần chất lưu thứ nhất là H₂S, NH₃, hoặc tổ hợp của chúng.

Phương án 30. Phương pháp theo phương án 24, trong đó thành phần chất lưu thứ nhất là SO₂, N₂O, NO, NO₂, lưu huỳnh oxit, hoặc tổ hợp của chúng, chất lưu đầu vào tùy ý bao gồm khí thải.

Phương án 31. Phương pháp theo phương án 24, trong đó thành phần chất lưu thứ nhất là N₂, dòng chất lưu đầu vào tùy ý bao gồm dòng khí tự nhiên.

Phương án 32. Phương pháp theo phương án 31, trong đó dòng chất lưu đầu vào được tiếp xúc với chất hấp phụ ở nhiệt độ từ khoảng 223K (-50,15°C) đến khoảng 523K (249,85°C), một cách tùy ý, ít nhất là khoảng 270K (-3,15°C).

Phương án 33. Phương pháp theo phương án 24, trong đó thành phần chất lưu thứ nhất là khí hiếm, halogen phân tử, halogen hydrua, hoặc tổ hợp của chúng.

Phương án 34. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án trên, trong đó thành phần chất lưu thứ nhất là metan, etylen, etan, metanol, dimetyl ete, hoặc tổ hợp của chúng.

Phương án 35. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án trên, trong đó thành phần chất lưu thứ hai là nitơ, thành phần chất lưu thứ nhất là hydro, khí hiếm, oxy, nitơ oxit, CO₂, CO, halogen phân tử, a halogen hydrua, hoặc tổ hợp của chúng.

Phương án 36. Phương pháp theo phương án 35, trong đó thành phần chất lưu thứ nhất là CO₂.

Phương án 37. Phương pháp theo phương án 36, trong đó dòng chất lưu đầu vào bao gồm khí thải.

Phương án 38. Phương pháp theo phương án 35, trong đó thành phần chất lưu thứ nhất là O_2 .

Phương án 39. Phương pháp theo phương án 26, trong đó dòng chất lưu đầu vào bao gồm không khí.

Phương án 40. Phương pháp theo phương án 35, trong đó halogen phân tử hoặc hợp chất có chứa halogen bao gồm F, Cl, Br, hoặc tổ hợp của chúng như halogen.

Phương án 41. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án trên, trong đó thành phần chất lưu thứ nhất là CO_2 và thành phần chất lưu thứ hai bao gồm một hoặc nhiều hydrocarbon.

Phương án 42. Phương pháp theo phương án 29, trong đó một hoặc nhiều hydrocarbon là metan, etan, etylen, hoặc tổ hợp của chúng.

Phương án 43. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án trên, trong đó thành phần chất lưu thứ nhất là etylen và thành phần chất lưu thứ hai là etan, metan, hoặc tổ hợp của chúng.

Phương án 44. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án trên, trong đó thành phần chất lưu thứ nhất là nitơ oxit và thành phần chất lưu thứ hai là lưu huỳnh oxit.

Phương án 45. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án trên, trong đó thành phần chất lưu thứ nhất là H_2 và thành phần chất lưu thứ hai là nitơ oxit, lưu huỳnh oxit, hydrocarbon, carbon oxit, hoặc tổ hợp của chúng, dòng chất lưu đầu vào tùy ý bao gồm khí tổng hợp.

Phương án 46. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án trên, trong đó thành phần chất lưu thứ nhất là H_2 và thành phần chất lưu thứ hai là H_2S , NH_3 , hoặc tổ hợp của chúng.

Phương án 47. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án trên, trong đó thành phần chất lưu thứ nhất là H_2O và thành phần chất lưu thứ hai là H_2 .

Phương án 48. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án trên, trong đó thành phần chất lưu thứ nhất là He, Ne, Ar, Kr, và thành phần chất lưu thứ hai là N_2 , H_2O , CO, CO_2 , hydrocarbon, hoặc tổ hợp của chúng.

Phương án 49. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án trên, trong đó thành phần chất lưu thứ nhất là metanol, dimetyl ete, hoặc tổ hợp của chúng.

Phương án 50. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án trên, trong đó thành phần chất lưu thứ hai là metanol, dimetyl ete, hoặc tổ hợp của chúng.

Phương án 51. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án trên, trong đó thành phần chất lưu thứ nhất là acetylen và thành phần chất lưu thứ hai là etylen, metan, etan, hoặc tổ hợp của chúng.

Phương án 52. Phương pháp theo phương án 8 hoặc 9, trong đó dòng chất lưu đầu vào bao gồm khí tự nhiên.

Phương án 53. Phương pháp theo phương án 52, trong đó dòng chất lưu đầu vào được tiếp xúc với chất hấp phụ chứa zeolit ITQ-55 ở áp suất nằm trong khoảng từ 5psi (khoảng 0,03MPa) đến khoảng 5000psi (khoảng 35MPa), một cách tùy ý ít nhất là khoảng 250psi (khoảng 1,7 MPa), hoặc ít nhất là khoảng 500psi (khoảng 3,4MPa), hoặc ít nhất là khoảng 1000psi (khoảng 6,9MPa).

Phương án 54. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án từ 52 đến 53, trong đó dòng chất lưu đầu vào được tiếp xúc với chất hấp phụ ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ khoảng -18°C đến khoảng 399°C , hoặc nhỏ hơn hoặc bằng khoảng 316°C , hoặc nhỏ hơn hoặc bằng khoảng 260°C .

Phương án 55. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án từ 52 đến 54, trong đó thành phần chất lưu thứ nhất là N_2 , H_2O , CO_2 , hoặc tổ hợp của chúng.

Phương án 56. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án từ 52 đến 54, trong đó thành phần chất lưu thứ nhất là ít nhất một trong số N_2 và H_2O .

Phương án 57. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án từ 52 đến 54, trong đó thành phần chất lưu thứ nhất là N_2 .

Phương án 58. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án từ 52 đến 54, trong đó thành phần chất lưu thứ nhất là H_2O .

Phương án 59. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án từ 52 đến 58, trong đó thành phần chất lưu thứ hai là CH_4 , hydrocarbon có phân tử lượng cao hơn CH_4 , hoặc tổ hợp của chúng.

Các phương án lưu trữ bổ sung

Phương án 1. Phương pháp hấp phụ và lưu trữ các chất lưu, bao gồm: cho dòng chất lưu đầu vào chứa thành phần chất lưu thứ nhất tiếp xúc với chất hấp phụ chứa zeolit ITQ-55 tại áp suất thứ nhất và nhiệt độ thứ nhất; duy trì chất hấp phụ ở áp suất thứ hai và nhiệt độ thứ hai trong khoảng thời gian lưu; tạo thành dòng chất lưu sản phẩm được hấp phụ bao gồm thành phần chất lưu thứ nhất; và gom dòng sản phẩm được hấp phụ, trong đó nguyên tử tứ diện được xác định bằng cách nối các nguyên tử T gần nhất theo cách được mô tả trong bảng sau:

Các liên kết nguyên tử tứ diện ITQ-55

Nguyên tử T	Được nối với:
T1	T6, T7, T55, T73
T2	T3, T5, T9, T56
T3	T2, T7, T21, T27
T4	T8, T9, T58, T73
T5	T2, T8, T52, T59
T6	T1, T8, T53, T60
T7	T1, T3, T50, T61
T8	T4, T5, T6, T51
T9	T2, T4, T21, T63
T10	T15, T16, T64, T74
T11	T12, T14, T18, T65
T12	T11, T16, T30, T36
T13	T17, T18, T67, T74
T14	T11, T17, T43, T68
T15	T10, T17, T44, T69
T16	T10, T12, T41, T70
T17	T13, T14, T15, T42
T18	T11, T13, T30, T72
T19	T24, T25, T37, T73
T20	T21, T23, T27, T38
T21	T3, T9, T20, T25
T22	T26, T27, T40, T73
T23	T20, T26, T41, T70
T24	T19, T26, T42, T71
T25	T19, T21, T43, T68
T26	T22, T23, T24, T69
T27	T3, T20, T22, T45

T28	T33, T34, T46, T74
T29	T30, T32, T36, T47
T30	T12, T18, T29, T34
T31	T35, T36, T49, T74
T32	T29, T35, T50, T61
T33	T28, T35, T51, T62
T34	T28, T30, T52, T59
T35	T31, T32, T33, T60
T36	T12, T29, T31, T54
T37	T19, T42, T43, T75
T38	T20, T39, T41, T45
T39	T38, T43, T57, T63
T40	T22, T44, T45, T75
T41	T16, T23, T38, T44
T42	T17, T24, T37, T44
T43	T14, T25, T37, T39
T44	T15, T40, T41, T42
T45	T27, T38, T40, T57
T46	T28, T51, T52, T76
T47	T29, T48, T50, T54
T48	T47, T52, T66, T72
T49	T31, T53, T54, T76
T50	T7, T32, T47, T53
T51	T8, T33, T46, T53
T52	T5, T34, T46, T48
T53	T6, T49, T50, T51
T54	T36, T47, T49, T66
T55	T1, T60, T61, T75
T56	T2, T57, T59, T63
T57	T39, T45, T56, T61
T58	T4, T62, T63, T75
T59	T5, T34, T56, T62
T60	T6, T35, T55, T62
T61	T7, T32, T55, T57
T62	T33, T58, T59, T60
T63	T9, T39, T56, T58
T64	T10, T69, T70, T76
T65	T11, T66, T68, T72
T66	T48, T54, T65, T70
T67	T13, T71, T72, T76
T68	T14, T25, T65, T71
T69	T15, T26, T64, T71
T70	T16, T23, T64, T66
T71	T24, T67, T68, T69
T72	T18, T48, T65, T67
T73	T1, T4, T19, T22

T74	T10, T13, T28, T31
T75	T37, T40, T55, T58
T76	T46, T49, T64, T67.

Phương án 2. Phương pháp hấp phụ và lưu trữ các chất lưu, bao gồm: cho dòng chất lưu đầu vào chứa thành phần chất lưu thứ nhất tiếp xúc với chất hấp phụ chứa zeolit ITQ-55 tại áp suất thứ nhất và nhiệt độ thứ nhất; duy trì chất hấp phụ ở áp suất thứ hai và nhiệt độ thứ hai trong khoảng thời gian lưu; tạo thành dòng chất lưu sản phẩm được hấp phụ bao gồm thành phần chất lưu thứ nhất; và gom dòng sản phẩm được hấp phụ, trong đó zeolit ITQ-55, như được tổng hợp, có ảnh nhiễu xạ tia X với, ít nhất là, các trị số góc 2θ (độ) và các cường độ tương ứng (I/I_0):

2θ (độ) $\pm 0,5$	Cường độ (I/I_0)
5,8	w
7,7	w
8,9	w
9,3	mf
9,9	w
10,1	w
13,2	m
13,4	w
14,7	w
15,1	m
15,4	w
15,5	w
17,4	m
17,7	m
19,9	m
20,6	m
21,2	f
21,6	f
22,0	f
23,1	mf

24,4 m

27,0 m

trong đó I_0 là cường độ từ đỉnh cường độ mạnh nhất được gán trị số 100

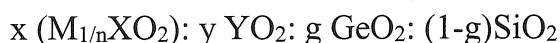
w là cường độ tương đối yếu nằm trong khoảng từ 0 đến 20%,

m là cường độ tương đối trung bình nằm trong khoảng từ 20 đến 40%,

f là cường độ tương đối mạnh nằm trong khoảng từ 40 đến 60%,

và mf là cường độ tương đối cực mạnh nằm trong khoảng từ 60 đến 100%,

Phương án 3. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án trên, trong đó zeolit ITQ-55 có, ở trạng thái được nung khô và không có các khuyết tật trong ma trận tinh thể của nó được biểu thị bởi sự có mặt của các silanol, công thức thực nghiệm



trong đó

M được chọn trong số H^+ , ít nhất một ion dương vô cơ có điện tích +n, và hỗn hợp của cả hai,

X là ít nhất một nguyên tố hóa học có trạng thái oxi hóa +3,

Y là ít nhất một nguyên tố hóa học có trạng thái oxi hóa +4, khác Si,

x có trị số nằm trong khoảng từ 0 đến 0,2, bao gồm cả 0 và 0,2,

y có trị số nằm trong khoảng từ 0 đến 0,1, bao gồm cả 0 và 0,1,

g có trị số nằm trong khoảng từ 0 đến 0,5, bao gồm cả 0 và 0,5,

Phương án 4. Phương pháp theo phương án 3, trong đó x có trị số về cơ bản bằng 0, y có trị số về cơ bản bằng 0, và g có trị số về cơ bản bằng 0.

Phương án 5. Phương pháp theo phương án 3, trong đó a) x có trị số lớn hơn 0, b) y có trị số lớn hơn 0, c) g có trị số lớn hơn 0, hoặc d) tổ hợp của chúng.

Phương án 6. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án trên, trong đó bước cho dòng chất lưu đầu vào tiếp xúc với chất hấp phụ bao gồm bước cho dòng chất lưu đầu vào tiếp xúc với chất hấp phụ trong bể hấp phụ dao động.

Phương án 7. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án trên, trong đó nhiệt độ thứ nhất và nhiệt độ thứ hai bằng nhau, trong đó áp suất thứ nhất và áp suất thứ hai bằng nhau, hoặc tổ hợp của chúng.

Phương án 8. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án trên, trong đó việc tạo thành dòng chất lưu sản phẩm được hấp phụ bao gồm bước thay đổi nhiệt độ thứ hai của chất hấp phụ.

Phương án 9. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án trên, trong đó việc tạo thành dòng chất lưu sản phẩm được hấp phụ bao gồm bước cho dòng chất lưu bao gồm thành phần thứ ba tiếp xúc với chất hấp phụ chứa zeolit ITQ-55, ít nhất một phần của thành phần thứ ba được hấp phụ bởi chất hấp phụ chứa zeolit ITQ-55.

Phương án 10. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án trên, trong đó chất hấp phụ có ít hơn khoảng 20% thể tích lỗ mở trong các lỗ có đường kính lớn hơn khoảng 20 Ångstrom và nhỏ hơn khoảng 1 μm .

Phương án 11. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án trên, trong đó việc duy trì chất hấp phụ ở áp suất thứ hai và nhiệt độ thứ hai trong khoảng thời gian lưu bao gồm việc cho chất hấp phụ tiếp xúc với môi trường có áp suất riêng phần của thành phần chất lưu thứ nhất là nhỏ hơn hoặc bằng khoảng 0,1MPa.

Phương án 12. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án trên, trong đó dòng chất lưu đầu vào còn bao gồm thành phần thứ hai, tỷ số mol của thành phần thứ nhất trên thành phần thứ hai trong dòng sản phẩm được hấp phụ lớn hơn tỷ số mol của thành phần thứ nhất trên thành phần thứ hai trong dòng chất lưu đầu vào.

Phương án 13. Phương pháp theo phương án 12, trong đó thành phần chất lưu thứ hai là metan, etan, metanol, dimetyl ete, hợp chất hữu cơ chứa ba hoặc nhiều hơn ba nguyên tử nặng, hoặc tổ hợp của chúng.

Phương án 14. Phương pháp theo phương án 12, trong đó thành phần chất lưu thứ nhất là H_2 và thành phần chất lưu thứ hai là nitơ oxit, lưu huỳnh oxit, hydrocarbon, carbon oxit, hoặc tổ hợp của chúng, dòng chất lưu đầu vào tùy ý bao gồm khí tổng hợp.

Phương án 15. Phương pháp theo phương án 12, trong đó thành phần chất lưu thứ nhất là H_2 và thành phần chất lưu thứ hai là H_2S , NH_3 , hoặc tổ hợp của chúng.

Phương án 16. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án trên, trong đó thành phần chất lưu thứ nhất là CO_2 , H_2 , hoặc tổ hợp của chúng.

Phương án 17. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án trên, trong đó thành phần chất lưu thứ nhất là etylen, acetylen, formandehyt, hoặc tổ hợp của chúng.

Phương án 18. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án trên, trong đó thành phần chất lưu thứ nhất là khí hiếm, halogen phân tử, halogen hydrua, hoặc tổ hợp của chúng.

Phương án 19. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án trên, trong đó thành phần chất lưu thứ nhất là metan, etylen, etan, metanol, dimetyl ete, hoặc tổ hợp của chúng.

Các phương án xúc tác bổ sung

Phương án 1. Phương pháp chuyển hóa các hợp chất hữu cơ, bao gồm: cho dòng chất lưu đầu vào bao gồm hợp chất hữu cơ tiếp xúc với chất xúc tác chứa zeolit ITQ-55 dưới các điều kiện chuyển hóa hiệu quả để tạo thành hợp chất hữu cơ được chuyển hóa, việc chuyển hóa được xúc tác bởi chất xúc tác chứa zeolit ITQ-55, trong đó nguyên tử tứ diện được xác định bằng cách nối các nguyên tử T gần nhất theo cách được mô tả trong Bảng sau:

Các liên kết nguyên tử tứ diện ITQ-55

Nguyên tử T	Được nối với:
T1	T6, T7, T55, T73
T2	T3, T5, T9, T56
T3	T2, T7, T21, T27
T4	T8, T9, T58, T73
T5	T2, T8, T52, T59
T6	T1, T8, T53, T60
T7	T1, T3, T50, T61
T8	T4, T5, T6, T51
T9	T2, T4, T21, T63
T10	T15, T16, T64, T74
T11	T12, T14, T18, T65
T12	T11, T16, T30, T36
T13	T17, T18, T67, T74
T14	T11, T17, T43, T68
T15	T10, T17, T44, T69
T16	T10, T12, T41, T70

T17	T13, T14, T15, T42
T18	T11, T13, T30, T72
T19	T24, T25, T37, T73
T20	T21, T23, T27, T38
T21	T3, T9, T20, T25
T22	T26, T27, T40, T73
T23	T20, T26, T41, T70
T24	T19, T26, T42, T71
T25	T19, T21, T43, T68
T26	T22, T23, T24, T69
T27	T3, T20, T22, T45
T28	T33, T34, T46, T74
T29	T30, T32, T36, T47
T30	T12, T18, T29, T34
T31	T35, T36, T49, T74
T32	T29, T35, T50, T61
T33	T28, T35, T51, T62
T34	T28, T30, T52, T59
T35	T31, T32, T33, T60
T36	T12, T29, T31, T54
T37	T19, T42, T43, T75
T38	T20, T39, T41, T45
T39	T38, T43, T57, T63
T40	T22, T44, T45, T75
T41	T16, T23, T38, T44
T42	T17, T24, T37, T44
T43	T14, T25, T37, T39
T44	T15, T40, T41, T42
T45	T27, T38, T40, T57
T46	T28, T51, T52, T76
T47	T29, T48, T50, T54
T48	T47, T52, T66, T72
T49	T31, T53, T54, T76
T50	T7, T32, T47, T53
T51	T8, T33, T46, T53
T52	T5, T34, T46, T48
T53	T6, T49, T50, T51
T54	T36, T47, T49, T66
T55	T1, T60, T61, T75
T56	T2, T57, T59, T63
T57	T39, T45, T56, T61
T58	T4, T62, T63, T75
T59	T5, T34, T56, T62
T60	T6, T35, T55, T62
T61	T7, T32, T55, T57
T62	T33, T58, T59, T60

T63	T9, T39, T56, T58
T64	T10, T69, T70, T76
T65	T11, T66, T68, T72
T66	T48, T54, T65, T70
T67	T13, T71, T72, T76
T68	T14, T25, T65, T71
T69	T15, T26, T64, T71
T70	T16, T23, T64, T66
T71	T24, T67, T68, T69
T72	T18, T48, T65, T67
T73	T1, T4, T19, T22
T74	T10, T13, T28, T31
T75	T37, T40, T55, T58
T76	T46, T49, T64, T67.

Phương án 2. Phương pháp chuyển hóa các hợp chất hữu cơ, bao gồm: cho dòng chất lưu đầu vào chứa hợp chất hữu cơ tiếp xúc với chất xúc tác chứa zeolit ITQ-55 dưới các điều kiện chuyển hóa hiệu quả để tạo thành hợp chất hữu cơ được chuyển hóa, việc chuyển hóa được xúc tác bởi chất xúc tác chứa zeolit ITQ-55, trong đó zeolit ITQ-55, như được tổng hợp, có ảnh mẫu nhiễu xạ tia X với, ít nhất là, các trị số góc 2θ (độ) và các cường độ tương ứng (I/I_0):

2θ (độ) $\pm 0,5$	Cường độ (I/I_0)
5,8	w
7,7	w
8,9	w
9,3	mf
9,9	w
10,1	w
13,2	m
13,4	w
14,7	w
15,1	m
15,4	w
15,5	w
17,4	m
17,7	m
19,9	m

20,6	m
21,2	f
21,6	f
22,0	f
23,1	mf
24,4	m
27,0	m

trong đó I_0 là cường độ từ đỉnh cường độ mạnh nhất được gán trị số 100

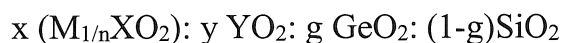
w là cường độ tương đối yếu nằm trong khoảng từ 0 đến 20%,

m là cường độ tương đối trung bình nằm trong khoảng từ 20 đến 40%,

f là cường độ tương đối mạnh nằm trong khoảng từ 40 đến 60%,

và mf là cường độ tương đối cực mạnh nằm trong khoảng từ 60 đến 100%,

Phương án 3. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án trên, trong đó zeolit ITQ-55 có, ở trạng thái được nung khô và không có các khuyết tật trong ma trận tinh thể của nó được biểu thị bởi sự có mặt của các silanol, công thức thực nghiệm



trong đó:

M được chọn trong số H^+ , ít nhất một ion dương vô cơ có điện tích +n, và hỗn hợp của cả hai,

X là ít nhất một nguyên tố hóa học có trạng thái oxi hóa +3,

Y là ít nhất một nguyên tố hóa học có trạng thái oxi hóa +4, khác Si,

x có trị số nằm trong khoảng từ 0 đến 0,2, bao gồm cả 0 và 0,2,

y có trị số nằm trong khoảng từ 0 đến 0,1, bao gồm cả 0 và 0,1,

g có trị số nằm trong khoảng từ 0 đến 0,5, bao gồm cả 0 và 0,5.

Phương án 4. Phương pháp theo phương án 3, trong đó x có trị số về cơ bản bằng 0, y có trị số về cơ bản bằng 0, và g có trị số về cơ bản bằng 0.

Phương án 5. Phương pháp theo phương án 3, trong đó X được chọn lọc từ Al, Ga, B, Fe, Cr, và các tổ hợp của chúng, y có trị số bằng 0, và g có trị số bằng 0.

Phương án 6. Phương pháp theo phương án 5, trong đó zeolit ITQ-55 bao gồm Si, O, và Al.

Phương án 7. Phương pháp theo phương án 6, trong đó tỷ số của Si với Al nằm trong khoảng từ khoảng 10 : 1 đến khoảng 1000 : 1, tùy ý ít nhất là khoảng 100 : 1.

Phương án 8. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án trên, trong đó việc cho dòng chất lưu đầu vào tiếp xúc với chất xúc tác chứa zeolit ITQ-55 bao gồm việc cho dòng chất lưu đầu vào tiếp xúc với các hạt chất xúc tác chứa zeolit ITQ-55.

Phương án 9. Phương pháp theo phương án 8, trong đó dòng chất lưu đầu vào được tiếp xúc với các hạt chất xúc tác chứa zeolit ITQ-55 trong lò phản ứng tầng sôi hoặc lò phản ứng ống đứng.

Phương án 10. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án 8 hoặc 9, trong đó các hạt chất xúc tác chứa zeolit ITQ-55 còn bao gồm giá đỡ, giá đỡ bao gồm silic oxit, nhôm oxit, silic oxit-nhôm oxit, ziricon oxit, titan oxit, hoặc tổ hợp của chúng.

Phương án 11. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án 8 đến 10, trong đó các hạt chất xúc tác bao gồm kim loại Nhóm VI, kim loại Nhóm VIII, hoặc tổ hợp của chúng.

Phương án 12. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án 8 hoặc 11, trong đó các hạt chất xúc tác còn bao gồm zeolit có cấu trúc khung khác zeolit ITQ-55.

Phương án 13. Phương pháp theo phương án 12, trong đó zeolit có cấu trúc khung khác zeolit ITQ-55 bao gồm zeolit có cấu trúc khung là MFI hoặc FAU.

Phương án 14. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án trên, trong đó hợp chất hữu cơ được chuyển hóa có phân tử lượng cao hơn các hợp chất hữu cơ, hoặc trong đó hợp chất hữu cơ được chuyển hóa có phân tử lượng thấp hơn hợp chất hữu cơ.

Phương án 15. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án trên, trong đó hợp chất hữu cơ bao gồm metanol, metan, dimetyl ete, etylen, axetylen, hoặc tổ hợp của chúng.

Phương án 16. Phương pháp theo phương án 15, trong đó dòng cấp đầu vào còn bao gồm O₂, H₂O, hoặc tổ hợp của chúng.

Phương án 17. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án 15 hoặc 16, trong đó hợp chất hữu cơ được chuyển hóa bao gồm etylen.

Phương án 18. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án trên, trong đó hợp chất hữu cơ bao gồm metanol và hợp chất hữu cơ được chuyển hóa bao gồm dimetyl ete.

Phương án 19. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án trên, trong đó hợp chất hữu cơ bao gồm metanol và hợp chất hữu cơ được chuyển hóa bao gồm olefin.

Phương án 20. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án trên, trong đó hợp chất hữu cơ bao gồm metanol và hợp chất hữu cơ được chuyển hóa bao gồm chất thơm $C_6 - C_{11}$.

Phương án 21. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án trên, trong đó hợp chất hữu cơ bao gồm metan và hợp chất hữu cơ được chuyển hóa bao gồm rượu, olefin, chất thơm $C_6 - C_{11}$, hoặc tổ hợp của chúng.

Phương án 22. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án trên, trong đó dòng cấp đầu vào được tiếp xúc với chất xúc tác bao gồm ITQ-55 trong sự có mặt của hydro.

Phương án 23. Phương pháp theo phương án 22, trong đó hợp chất hữu cơ bao gồm hợp chất chứa lưu huỳnh và hợp chất hữu cơ được chuyển hóa bao gồm hợp chất hữu cơ được khử lưu huỳnh.

Phương án 24. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án trên, trong đó việc cho chất lưu đầu vào tiếp xúc với chất xúc tác chứa zeolit ITQ-55 bao gồm: cho chất lưu đầu vào tiếp xúc với chất xúc tác ở các điều kiện bao gồm nhiệt độ thứ nhất và áp suất thứ nhất; và thay đổi các điều kiện thành nhiệt độ thứ hai và áp suất thứ hai để cho ít nhất một phần chất lưu đầu vào tiếp xúc với chất xúc tác ở nhiệt độ thứ hai và áp suất thứ hai, tốc độ khuếch tán của hợp chất hữu cơ ở nhiệt độ thứ hai và áp suất thứ hai nhỏ hơn hoặc bằng khoảng 50% tốc độ khuếch tán ở nhiệt độ thứ nhất và áp suất thứ nhất, hoặc nhỏ hơn hoặc bằng khoảng 40%, hoặc nhỏ hơn hoặc bằng khoảng 30%, hoặc nhỏ hơn hoặc bằng khoảng 20%, hoặc nhỏ hơn hoặc bằng khoảng 10%.

Phương án 25. Phương pháp theo phương án 24, trong đó nhiệt độ thứ hai bằng nhiệt độ thứ nhất.

Phương án 26. Phương pháp theo phương án 24, trong đó nhiệt độ thứ hai thấp hơn nhiệt độ thứ nhất.

Phương án 27. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án từ 24 đến 26, trong đó áp suất thứ nhất ít nhất là khoảng 100bar (10MPa) và áp suất thứ hai nhỏ hơn hoặc bằng khoảng 50bar (5MPa).

Các phương án chung bổ sung

Các phương án sau đây phù hợp để tổ hợp với phương án bất kỳ trong số các phương án phân tách bổ sung, các phương án lưu trữ bổ sung, hoặc các phương án xúc tác bổ sung được mô tả ở trên.

Phương án 1. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án phân tách bổ sung, phương án lưu trữ bổ sung, và/hoặc phương án xúc tác bổ sung ở trên, trong đó zeolit ITQ-55, như được tổng hợp, có ảnh nhiễu xạ tia X với, ít nhất, các trị số góc 2θ (độ) và cường độ tương đối (I/I_0):

2θ (độ) $\pm 0,5$	Cường độ (I/I_0)
5,8	w
7,7	w
8,9	w
9,3	mf
9,9	w
10,1	w
13,2	m
13,4	w
14,7	w
15,1	m
15,4	w
15,5	w
17,4	m
17,7	m
19,9	m
20,6	m

21,2	f
21,6	f
22,0	f
23,1	mf
24,4	m
27,0	m

trong đó I_0 là cường độ từ đỉnh cường độ mạnh nhất được gán trị số 100

w là cường độ tương đối yếu nằm trong khoảng từ 0 đến 20%,

m là cường độ tương đối trung bình nằm trong khoảng từ 20 đến 40%,

f là cường độ tương đối mạnh nằm trong khoảng từ 40 đến 60%,

và mf là cường độ tương đối cực mạnh nằm trong khoảng từ 60 đến 100%,

Phương án 2. Phương pháp theo phương án bất kỳ trong số các phương án phân tách bổ sung, phương án lưu trữ bổ sung, và/hoặc phương án xúc tác bổ sung, và/hoặc phương án chung bổ sung 1, trong đó ITQ-55 có khung là các nguyên tử tứ diện (T) được nối bởi các nguyên tử cầu nối, trong đó nguyên tử tứ diện được xác định bằng cách nối các nguyên tử T gần nhất theo cách được mô tả trong bảng sau:

Các liên kết nguyên tử tứ diện ITQ-55

Nguyên tử T	Được nối với:
T1	T6, T7, T55, T73
T2	T3, T5, T9, T56
T3	T2, T7, T21, T27
T4	T8, T9, T58, T73
T5	T2, T8, T52, T59
T6	T1, T8, T53, T60
T7	T1, T3, T50, T61
T8	T4, T5, T6, T51
T9	T2, T4, T21, T63
T10	T15, T16, T64, T74
T11	T12, T14, T18, T65
T12	T11, T16, T30, T36
T13	T17, T18, T67, T74
T14	T11, T17, T43, T68
T15	T10, T17, T44, T69
T16	T10, T12, T41, T70
T17	T13, T14, T15, T42
T18	T11, T13, T30, T72
T19	T24, T25, T37, T73
T20	T21, T23, T27, T38

T21	T3, T9, T20, T25
T22	T26, T27, T40, T73
T23	T20, T26, T41, T70
T24	T19, T26, T42, T71
T25	T19, T21, T43, T68
T26	T22, T23, T24, T69
T27	T3, T20, T22, T45
T28	T33, T34, T46, T74
T29	T30, T32, T36, T47
T30	T12, T18, T29, T34
T31	T35, T36, T49, T74
T32	T29, T35, T50, T61
T33	T28, T35, T51, T62
T34	T28, T30, T52, T59
T35	T31, T32, T33, T60
T36	T12, T29, T31, T54
T37	T19, T42, T43, T75
T38	T20, T39, T41, T45
T39	T38, T43, T57, T63
T40	T22, T44, T45, T75
T41	T16, T23, T38, T44
T42	T17, T24, T37, T44
T43	T14, T25, T37, T39
T44	T15, T40, T41, T42
T45	T27, T38, T40, T57
T46	T28, T51, T52, T76
T47	T29, T48, T50, T54
T48	T47, T52, T66, T72
T49	T31, T53, T54, T76
T50	T7, T32, T47, T53
T51	T8, T33, T46, T53
T52	T5, T34, T46, T48
T53	T6, T49, T50, T51
T54	T36, T47, T49, T66
T55	T1, T60, T61, T75
T56	T2, T57, T59, T63
T57	T39, T45, T56, T61
T58	T4, T62, T63, T75
T59	T5, T34, T56, T62
T60	T6, T35, T55, T62
T61	T7, T32, T55, T57
T62	T33, T58, T59, T60
T63	T9, T39, T56, T58
T64	T10, T69, T70, T76
T65	T11, T66, T68, T72
T66	T48, T54, T65, T70

T67	T13, T71, T72, T76
T68	T14, T25, T65, T71
T69	T15, T26, T64, T71
T70	T16, T23, T64, T66
T71	T24, T67, T68, T69
T72	T18, T48, T65, T67
T73	T1, T4, T19, T22
T74	T10, T13, T28, T31
T75	T37, T40, T55, T58
T76	T46, T49, T64, T67.

Khi các giới hạn dưới bằng số và các giới hạn trên bằng số được liệt kê ở đây, các phạm vi từ giới hạn dưới bất kỳ đến giới hạn trên bất kỳ được dự tính. Mặc dù các phương án minh họa của sáng chế đã được mô tả chi tiết, nhưng sẽ được hiểu rằng các biến đổi khác nhau sẽ là hiển nhiên và có thể dễ dàng được thực hiện bởi những người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực kỹ thuật tương ứng mà không rời khỏi nguyên lý và phạm vi của sáng chế. Theo đó, không có ý định rằng phạm vi của các yêu cầu bảo hộ kèm theo đây bị giới hạn bởi các ví dụ và sự mô tả được đưa ra ở đây mà đúng hơn là các yêu cầu bảo hộ sẽ được hiểu là bao gồm tất cả các dấu hiệu của tính mới có khả năng bảo hộ của sáng chế, bao gồm tất cả các dấu hiệu có thể được xem như các tương đương của nó bởi những người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực kỹ thuật mà sáng chế đề cập đến.

Sáng chế đã được mô tả ở trên với sự tham chiếu đến nhiều phương án và ví dụ cụ thể. Nhiều biến thể sẽ tự gợi ý cho những người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực kỹ thuật này nhờ phần mô tả chi tiết ở trên. Tất cả các biến thể rõ ràng này đều nằm trong toàn bộ phạm vi dự định của các yêu cầu bảo hộ kèm theo.

YÊU CẦU BẢO HỘ

1. Phương pháp hấp phụ và lưu trữ các chất lưu, phương pháp bao gồm:

cho dòng chất lưu đầu vào chứa thành phần chất lưu thứ nhất tiếp xúc với chất hấp phụ chứa zeolit ITQ-55 tại áp suất thứ nhất và nhiệt độ thứ nhất;

duy trì chất hấp phụ tại áp suất thứ hai và nhiệt độ thứ hai với một khoảng thời gian lưu;

tạo thành dòng chất lưu sản phẩm được hấp phụ chứa thành phần chất lưu thứ nhất; và

gom dòng sản phẩm được hấp phụ,

trong đó zeolit ITQ-55 có khung là các nguyên tử tứ diện (T) được nối bởi các nguyên tử cầu nối, trong đó nguyên tử tứ diện được xác định bằng cách nối các nguyên tử T gần nhất theo cách được mô tả trong bảng sau:

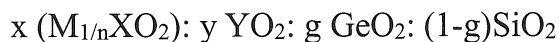
các liên kết nguyên tử tứ diện ITQ-55

nguyên tử T	được nối với:
T1	T6, T7, T55, T73
T2	T3, T5, T9, T56
T3	T2, T7, T21, T27
T4	T8, T9, T58, T73
T5	T2, T8, T52, T59
T6	T1, T8, T53, T60
T7	T1, T3, T50, T61
T8	T4, T5, T6, T51
T9	T2, T4, T21, T63
T10	T15, T16, T64, T74
T11	T12, T14, T18, T65
T12	T11, T16, T30, T36
T13	T17, T18, T67, T74
T14	T11, T17, T43, T68
T15	T10, T17, T44, T69
T16	T10, T12, T41, T70

T17	T13, T14, T15, T42
T18	T11, T13, T30, T72
T19	T24, T25, T37, T73
T20	T21, T23, T27, T38
T21	T3, T9, T20, T25
T22	T26, T27, T40, T73
T23	T20, T26, T41, T70
T24	T19, T26, T42, T71
T25	T19, T21, T43, T68
T26	T22, T23, T24, T69
T27	T3, T20, T22, T45
T28	T33, T34, T46, T74
T29	T30, T32, T36, T47
T30	T12, T18, T29, T34
T31	T35, T36, T49, T74
T32	T29, T35, T50, T61
T33	T28, T35, T51, T62
T34	T28, T30, T52, T59
T35	T31, T32, T33, T60
T36	T12, T29, T31, T54
T37	T19, T42, T43, T75
T38	T20, T39, T41, T45
T39	T38, T43, T57, T63
T40	T22, T44, T45, T75
T41	T16, T23, T38, T44
T42	T17, T24, T37, T44
T43	T14, T25, T37, T39
T44	T15, T40, T41, T42
T45	T27, T38, T40, T57
T46	T28, T51, T52, T76

T47	T29, T48, T50, T54
T48	T47, T52, T66, T72
T49	T31, T53, T54, T76
T50	T7, T32, T47, T53
T51	T8, T33, T46, T53
T52	T5, T34, T46, T48
T53	T6, T49, T50, T51
T54	T36, T47, T49, T66
T55	T1, T60, T61, T75
T56	T2, T57, T59, T63
T57	T39, T45, T56, T61
T58	T4, T62, T63, T75
T59	T5, T34, T56, T62
T60	T6, T35, T55, T62
T61	T7, T32, T55, T57
T62	T33, T58, T59, T60
T63	T9, T39, T56, T58
T64	T10, T69, T70, T76
T65	T11, T66, T68, T72
T66	T48, T54, T65, T70
T67	T13, T71, T72, T76
T68	T14, T25, T65, T71
T69	T15, T26, T64, T71
T70	T16, T23, T64, T66
T71	T24, T67, T68, T69
T72	T18, T48, T65, T67
T73	T1, T4, T19, T22
T74	T10, T13, T28, T31
T75	T37, T40, T55, T58
T76	T46, T49, T64, T67.

2. Phương pháp theo điểm 1, trong đó zeolit ITQ-55, ở trạng thái đã nung và không có các khuyết tật trong ma trận tinh thể của nó được biểu hiện bởi sự có mặt của các silanol, có công thức thực nghiệm



trong đó

M được chọn trong số H^+ , ít nhất một ion dương vô cơ có điện tích $+n$, và hỗn hợp của cả hai,

X là ít nhất một nguyên tố hóa học có trạng thái oxi hóa $+3$,

Y là ít nhất một nguyên tố hóa học có trạng thái oxi hóa $+4$, khác Si

x có trị số nằm trong khoảng 0 và 0,2, bao gồm cả 0 và 0,2,

y có trị số nằm trong khoảng 0 và 0,1, bao gồm cả 0 và 0,1,

g có trị số nằm trong khoảng 0 và 0,5, bao gồm cả 0 và 0,5.

3. Phương pháp theo điểm 2, trong đó x có giá trị về cơ bản bằng không, y có giá trị về cơ bản bằng không, và g có giá trị về cơ bản bằng không.

4. Phương pháp theo điểm 2, trong đó a) x có giá trị lớn hơn không, b) y có giá trị về cơ bản bằng không, c) g có giá trị về cơ bản bằng không, hoặc d) tổ hợp của chúng.

5. Phương pháp theo điểm 1, trong đó việc cho dòng chất lưu đầu vào tiếp xúc với chất hấp phụ bao gồm bước cho dòng chất lưu đầu vào tiếp xúc với chất hấp phụ trong bể hấp phụ dao động.

6. Phương pháp theo điểm 1, trong đó nhiệt độ thứ nhất và nhiệt độ thứ hai là như nhau, trong đó áp suất thứ nhất và áp suất thứ hai là như nhau, hoặc tổ hợp của chúng.

7. Phương pháp theo điểm 1, trong đó việc tạo thành dòng chất lưu sản phẩm được hấp phụ bao gồm bước thay đổi nhiệt độ thứ hai của chất hấp phụ.

8. Phương pháp theo điểm 1, trong đó việc tạo thành dòng chất lưu sản phẩm được hấp phụ bao gồm bước cho dòng chất lưu chứa thành phần thứ ba tiếp xúc với chất hấp phụ

chứa zeolit ITQ-55, ít nhất một phần của thành phần thứ ba được hấp phụ bởi chất hấp phụ chứa zeolit ITQ-55.

9. Phương pháp theo điểm 1, trong đó chất hấp phụ có ít hơn khoảng 20% thể tích lỗ mở trong các lỗ có đường kính lớn hơn khoảng 20 Ångstrom ($2 \cdot 10^{-3} \mu\text{m}$) và nhỏ hơn khoảng $1 \mu\text{m}$.

10. Phương pháp theo điểm 1, trong đó việc duy trì chất hấp phụ tại áp suất thứ hai và nhiệt độ thứ hai với một khoảng thời gian lưu bao gồm bước cho chất hấp phụ tiếp xúc với môi trường có áp suất riêng phần của thành phần chất lưu thứ nhất ở khoảng nhỏ hơn hoặc bằng 0,1 MPa.

11. Phương pháp theo điểm 1, trong đó dòng chất lưu đầu vào còn bao gồm thành phần thứ hai, tỉ số mol của thành phần thứ nhất trên thành phần thứ hai trong dòng sản phẩm được hấp phụ lớn hơn tỉ số mol của thành phần thứ nhất trên thành phần thứ hai trong dòng chất lưu đầu vào.

12. Phương pháp theo điểm 11, trong đó thành phần chất lưu thứ hai là metan, etan, metanol, dimetyl ete, hợp chất hữu cơ chứa ba hoặc nhiều hơn ba nguyên tử nặng, hoặc tổ hợp của chúng.

13. Phương pháp theo điểm 12, trong đó thành phần chất lưu thứ nhất là CO_2 .

14. Phương pháp theo điểm 11, trong đó thành phần chất lưu thứ nhất là H_2 và thành phần chất lưu thứ hai là nitơ oxit, lưu huỳnh oxit, hydrocarbon, carbon oxit, hoặc tổ hợp của chúng.

15. Phương pháp theo điểm 14, trong đó dòng chất lưu đầu vào chứa khí tổng hợp.

16. Phương pháp theo điểm 1, trong đó thành phần chất lưu thứ nhất là H_2 và thành phần chất lưu thứ hai là H_2S , NH_3 , hoặc tổ hợp của chúng.

17. Phương pháp theo điểm 1, trong đó thành phần chất lưu thứ nhất là CO_2 , H_2 , hoặc tổ hợp của chúng.

18. Phương pháp theo điểm 1, trong đó thành phần chất lưu thứ nhất là etylen, acetylen, formaldehyt, hoặc tổ hợp của chúng.

19. Phương pháp theo điểm 1, trong đó thành phần chất lưu thứ nhất là khí trơ, halogen phân tử, halogen hydrua, hoặc tổ hợp của chúng.

20. Phương pháp theo điểm 1, trong đó thành phần chất lưu thứ nhất là metan, etylen, etan, metanol, dimetyl ete, hoặc tổ hợp của chúng.

21. Phương pháp hấp phụ và lưu trữ chất lưu, phương pháp bao gồm:

cho dòng chất lưu đầu vào chứa thành phần chất lưu thứ nhất tiếp xúc với chất hấp phụ chứa zeolit ITQ-55 tại áp suất thứ nhất và nhiệt độ thứ nhất;

duy trì chất hấp phụ tại áp suất thứ hai và nhiệt độ thứ hai với một khoảng thời gian lưu;

tạo thành dòng chất lưu sản phẩm được hấp phụ chứa thành phần chất lưu thứ nhất; và

gom dòng sản phẩm được hấp phụ,

trong đó zeolit ITQ-55, như được tổng hợp, có ảnh nhiễu xạ tia X với, ít nhất, các trị số góc 2θ (độ) và cường độ tương đối (I/I_0):

2θ (độ) $\pm 0,5$	cường độ (I/I_0)
5,8	w
7,7	w
8,9	w
9,3	mf
9,9	w
10,1	w

13,2	m
13,4	w
14,7	w
15,1	m
15,4	w
15,5	w
17,4	m
17,7	m
19,9	m
20,6	m
21,2	f
21,6	f
22,0	f
23,1	mf
24,4	m
27,0	m

trong đó I_0 là cường độ từ đỉnh có cường độ lớn nhất đến đỉnh mà được gán trị số 100

w là cường độ tương đối yếu nằm trong khoảng 0 và 20%,

m là cường độ tương đối trung bình nằm trong khoảng 20 và 40%,

f là cường độ tương đối mạnh nằm trong khoảng 40 và 60%,

và mf là cường độ tương đối cực mạnh nằm trong khoảng 60 và 100%.

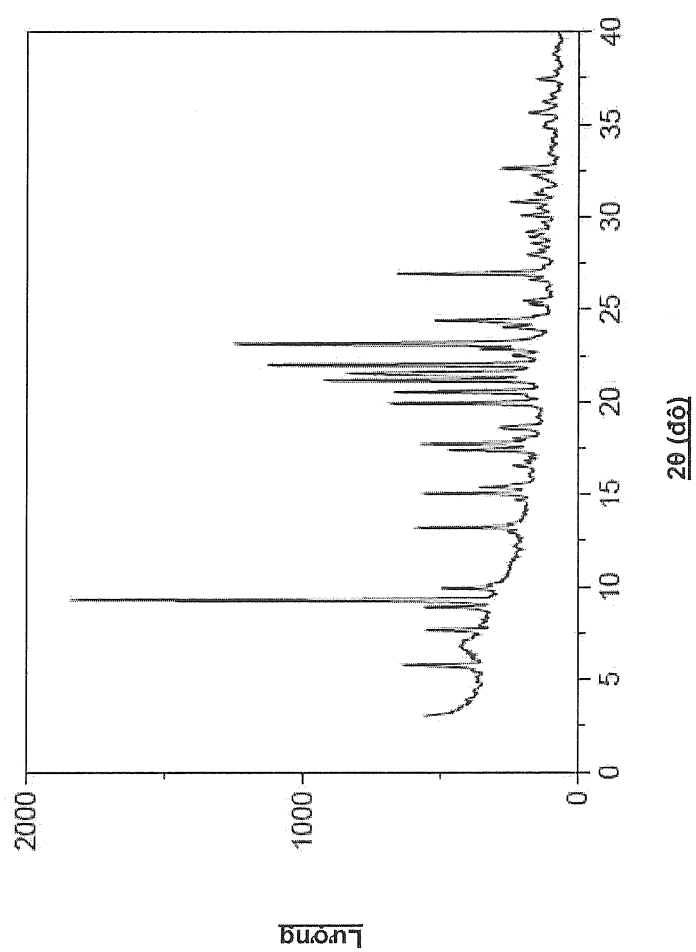


FIG. 1

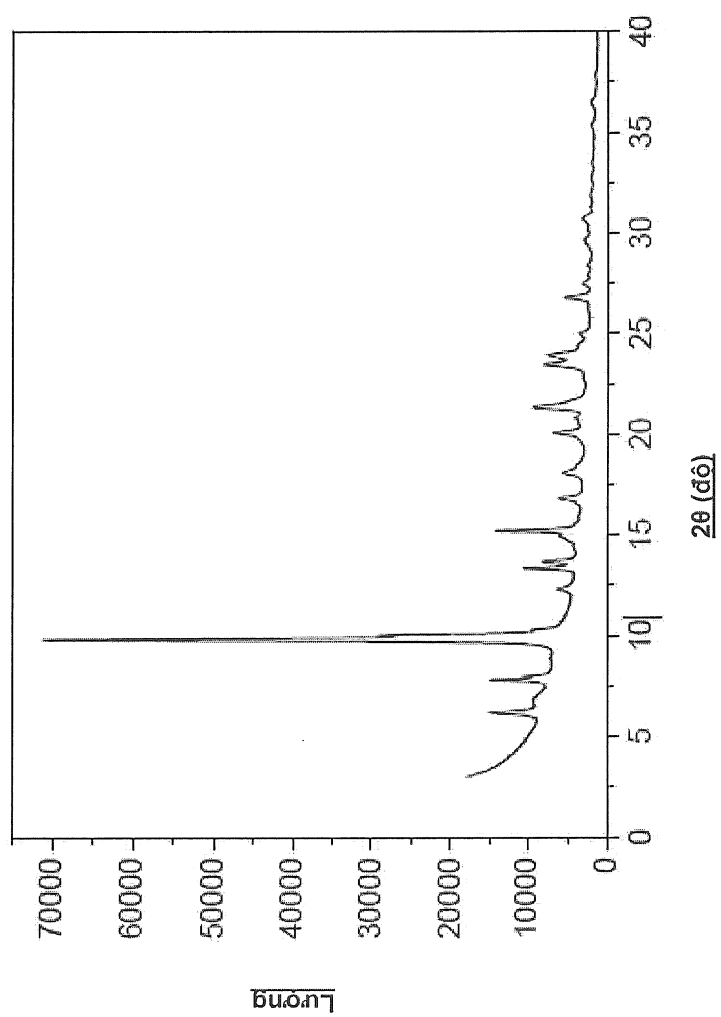


FIG. 2

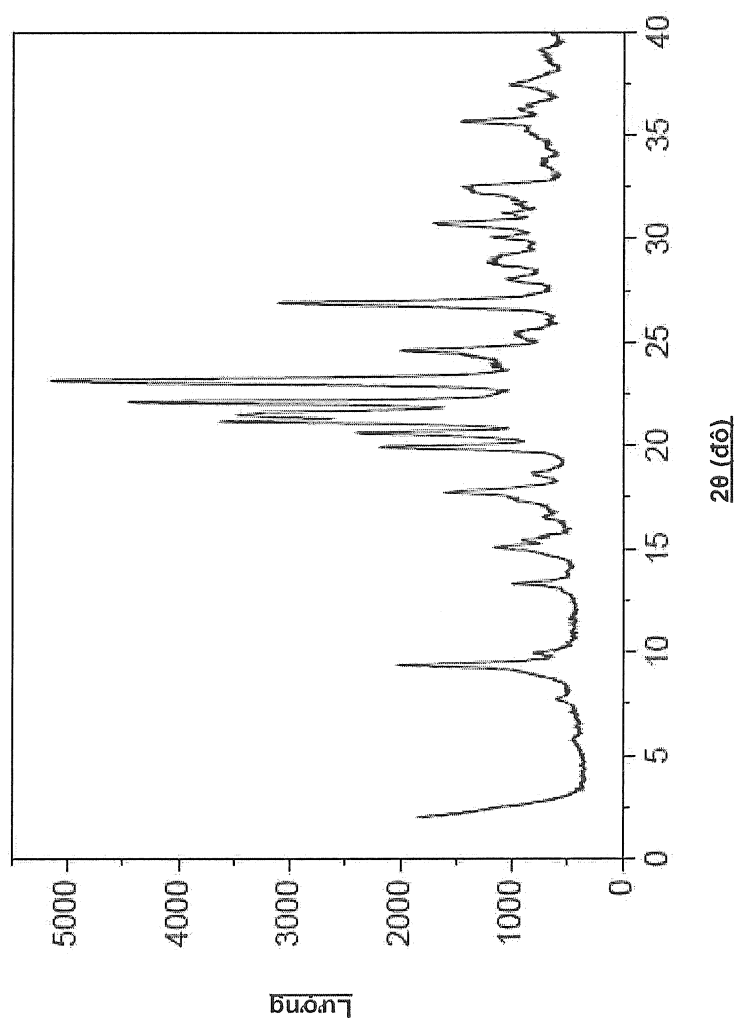


FIG. 3

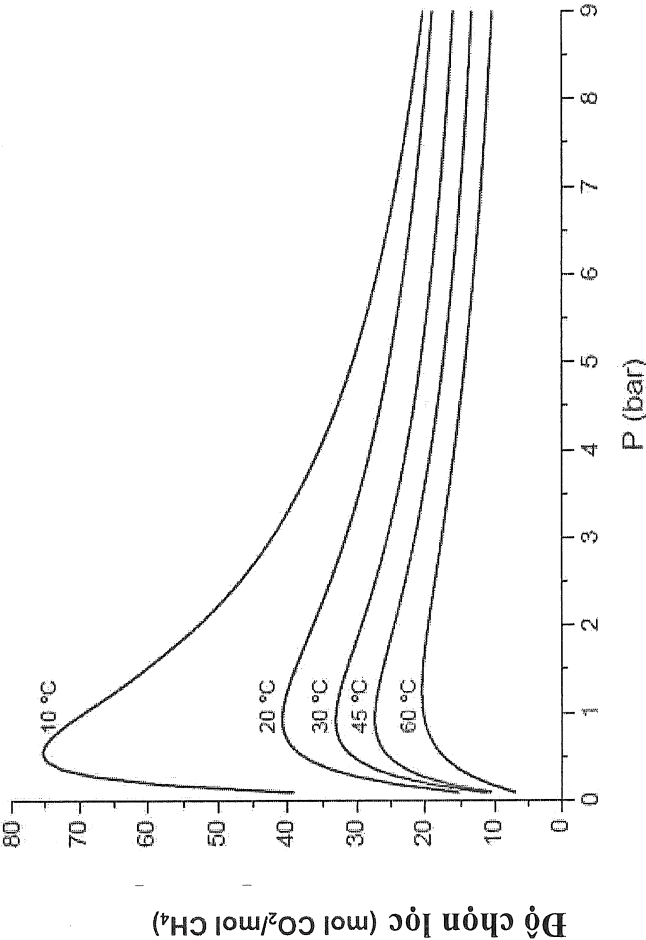


FIG. 4

Cấu trúc khung của ITQ-55 chỉ thể hiện các nguyên tử tứ diện.
Ô đơn vị mà có các cạnh được xác định bằng màu ghi.

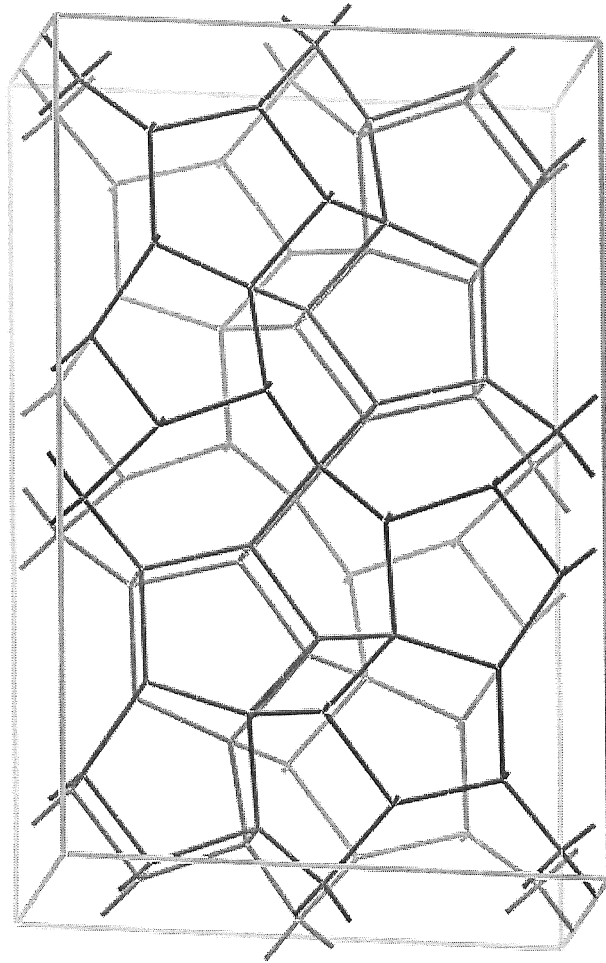


FIG. 5

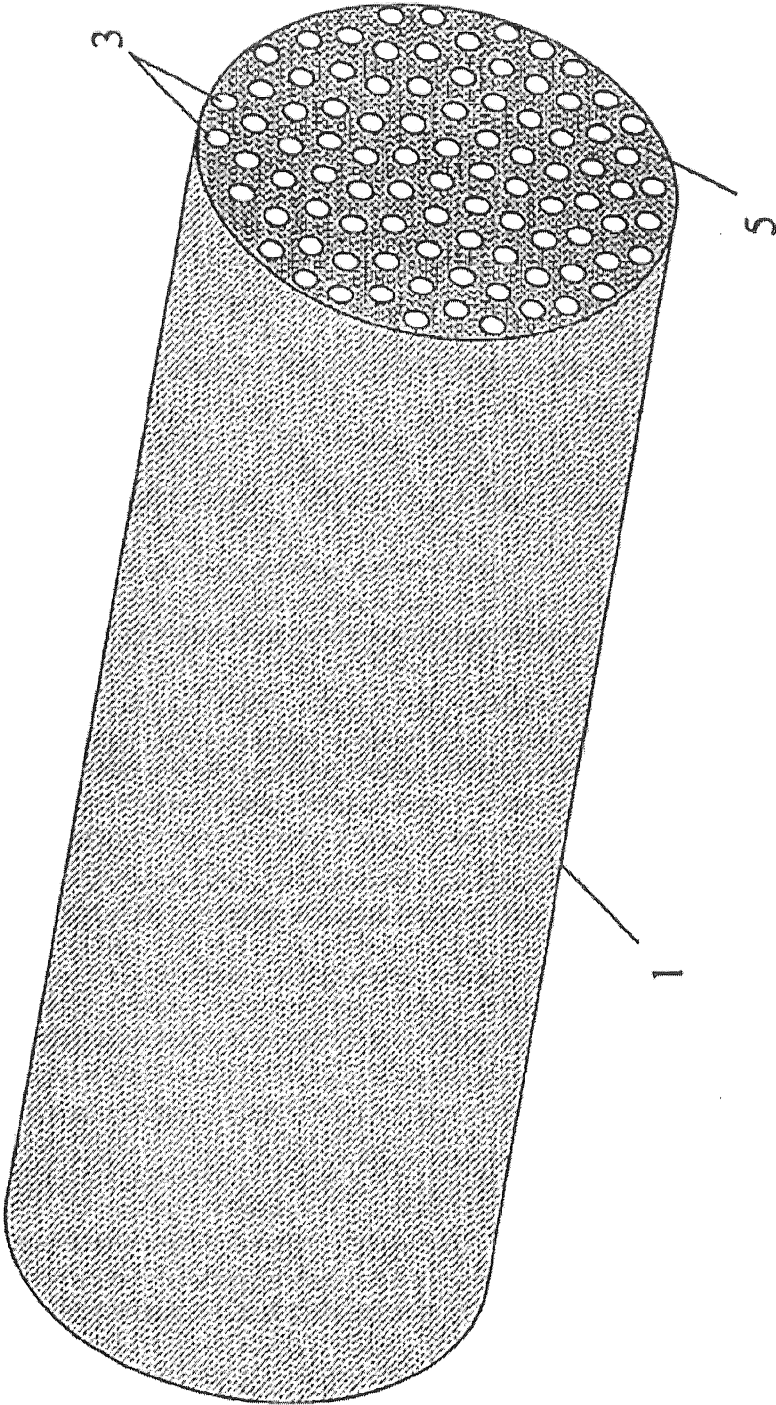


FIG. 6

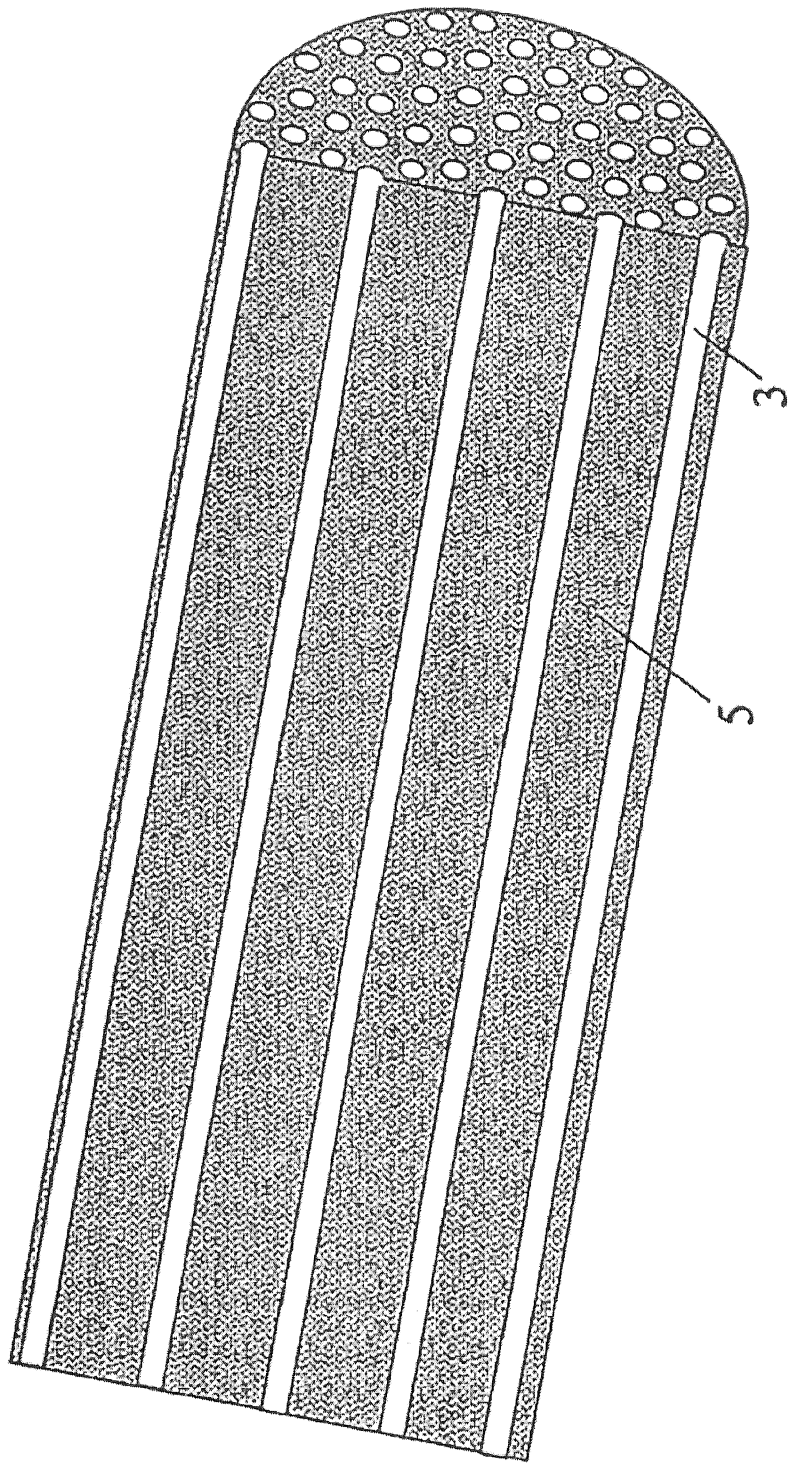


FIG. 7

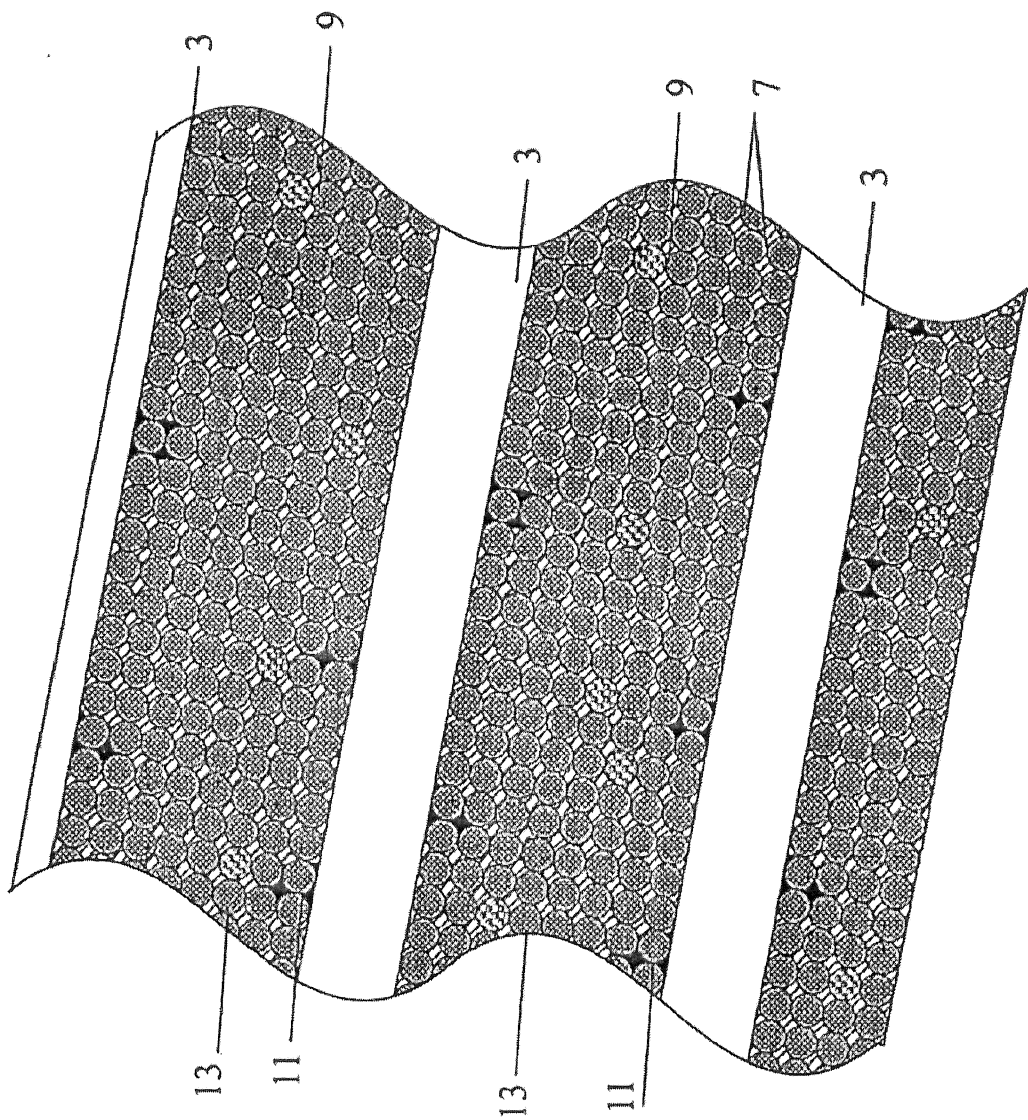


FIG. 8

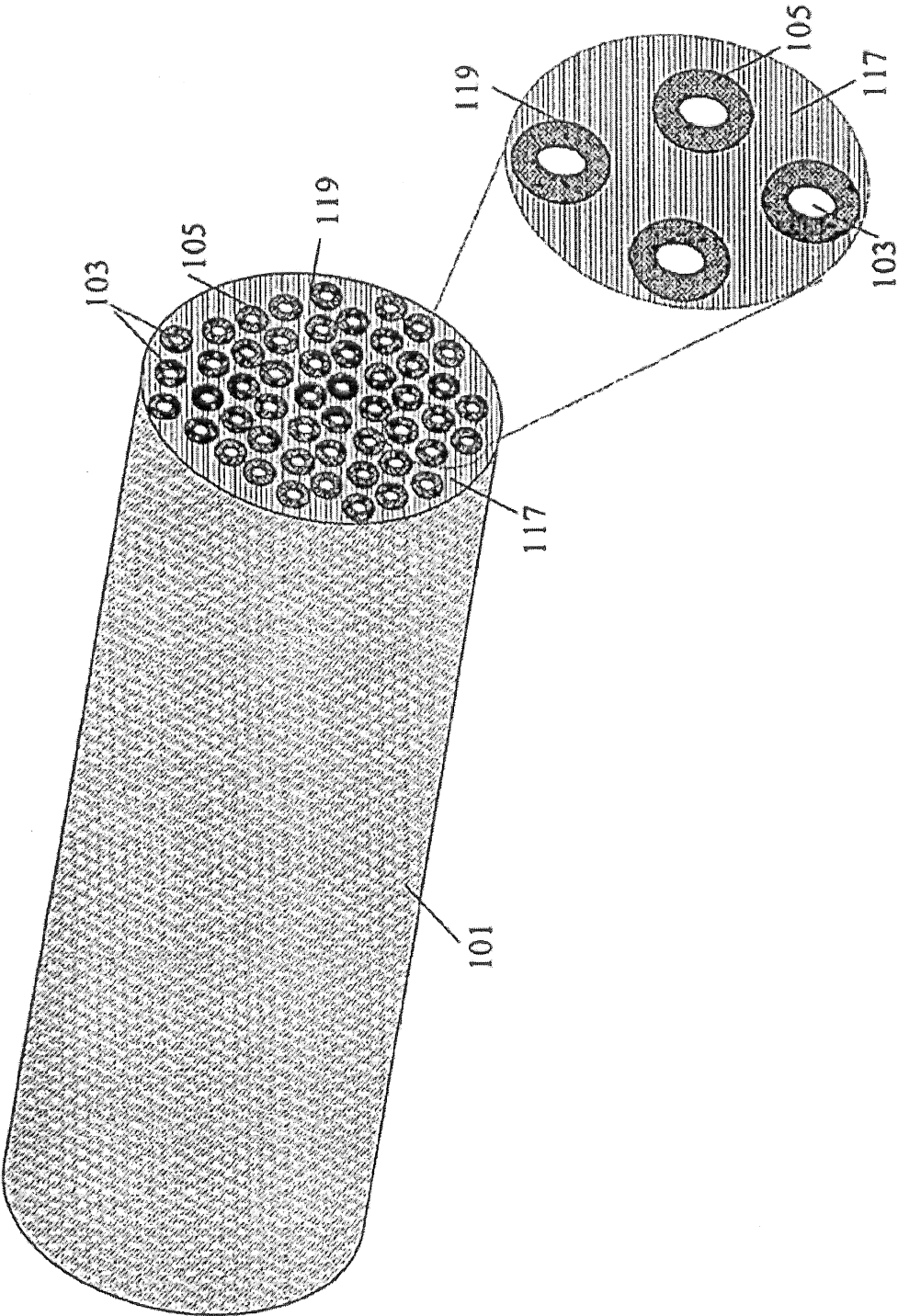


FIG. 9

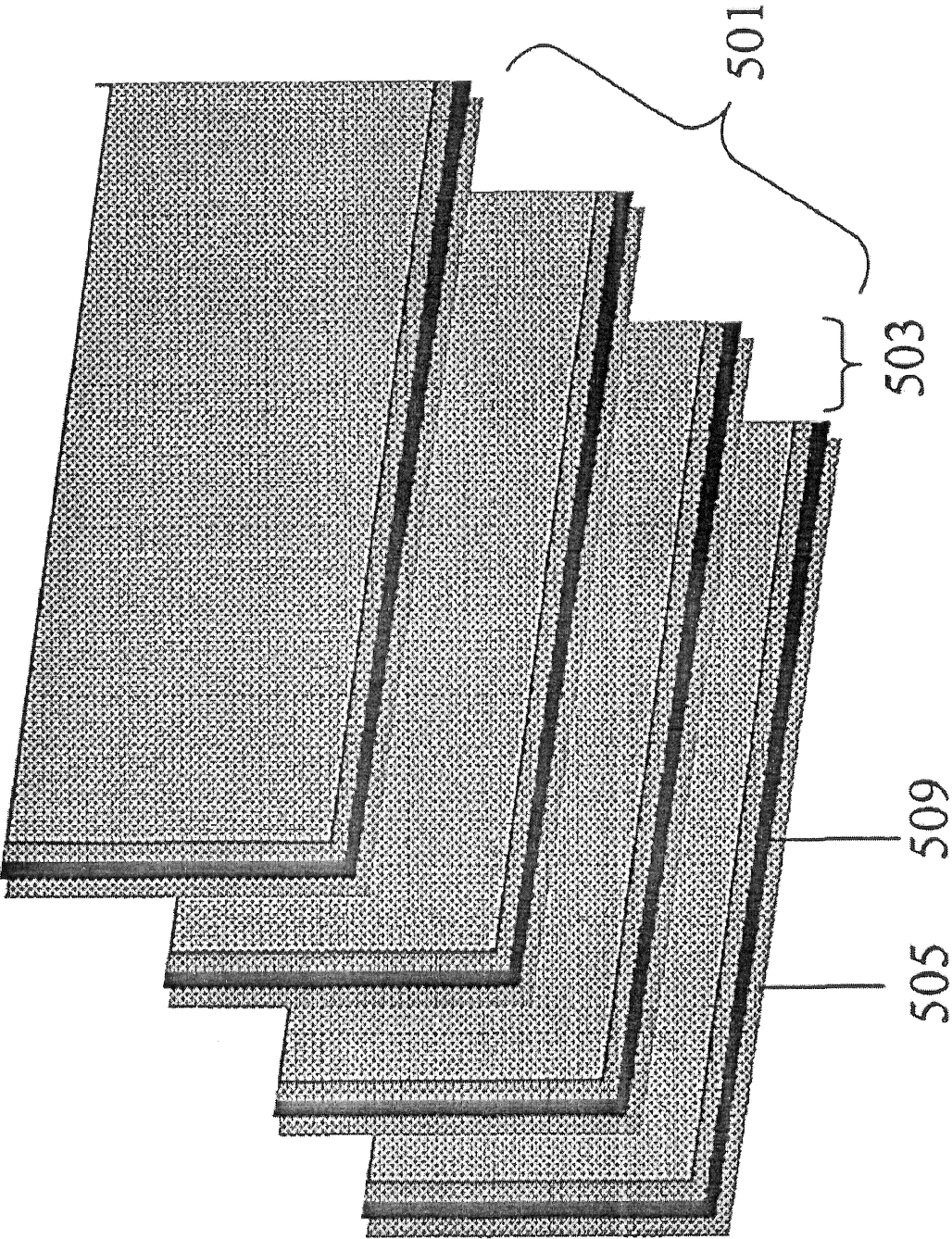


FIG. 10

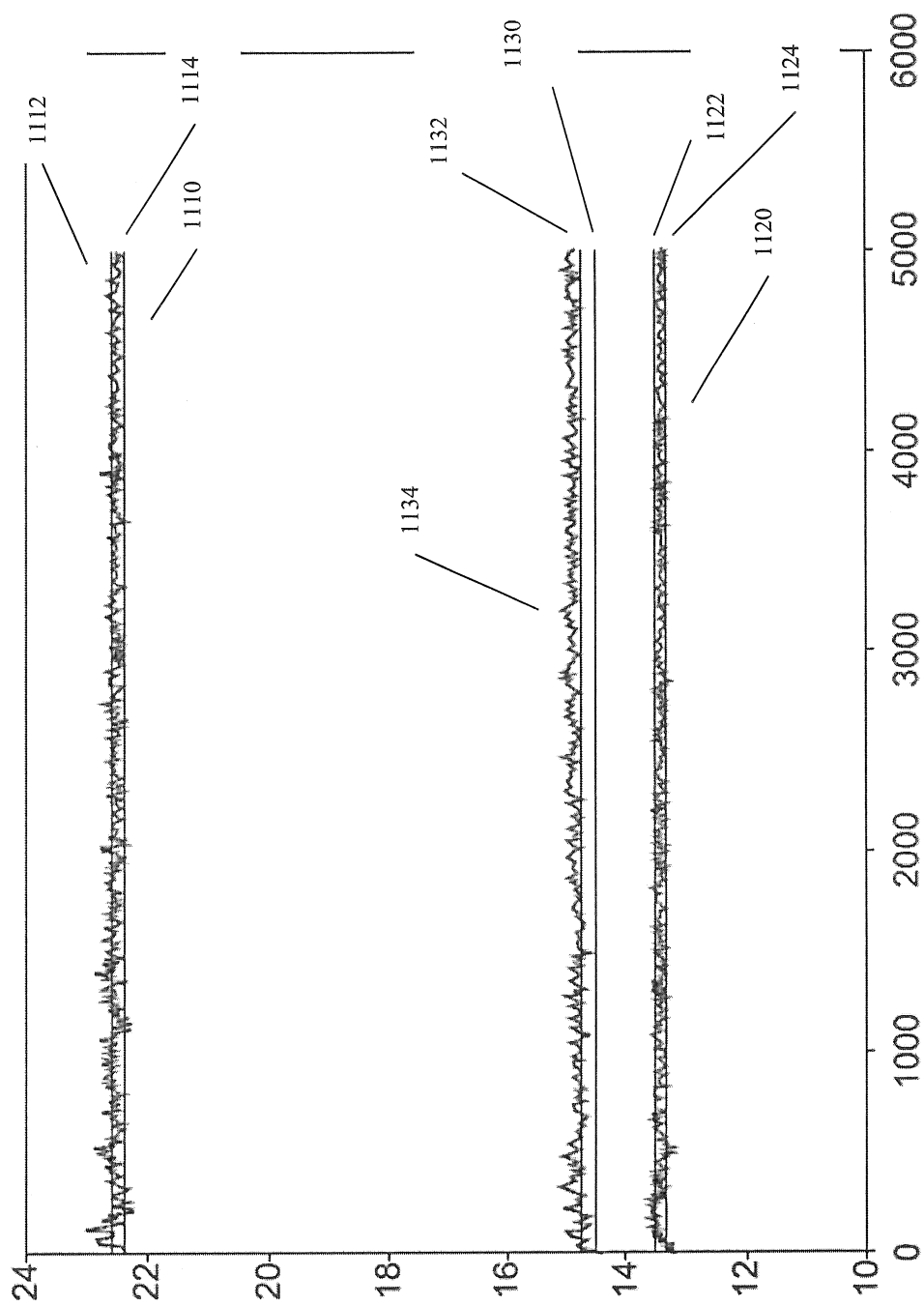


FIG. 11

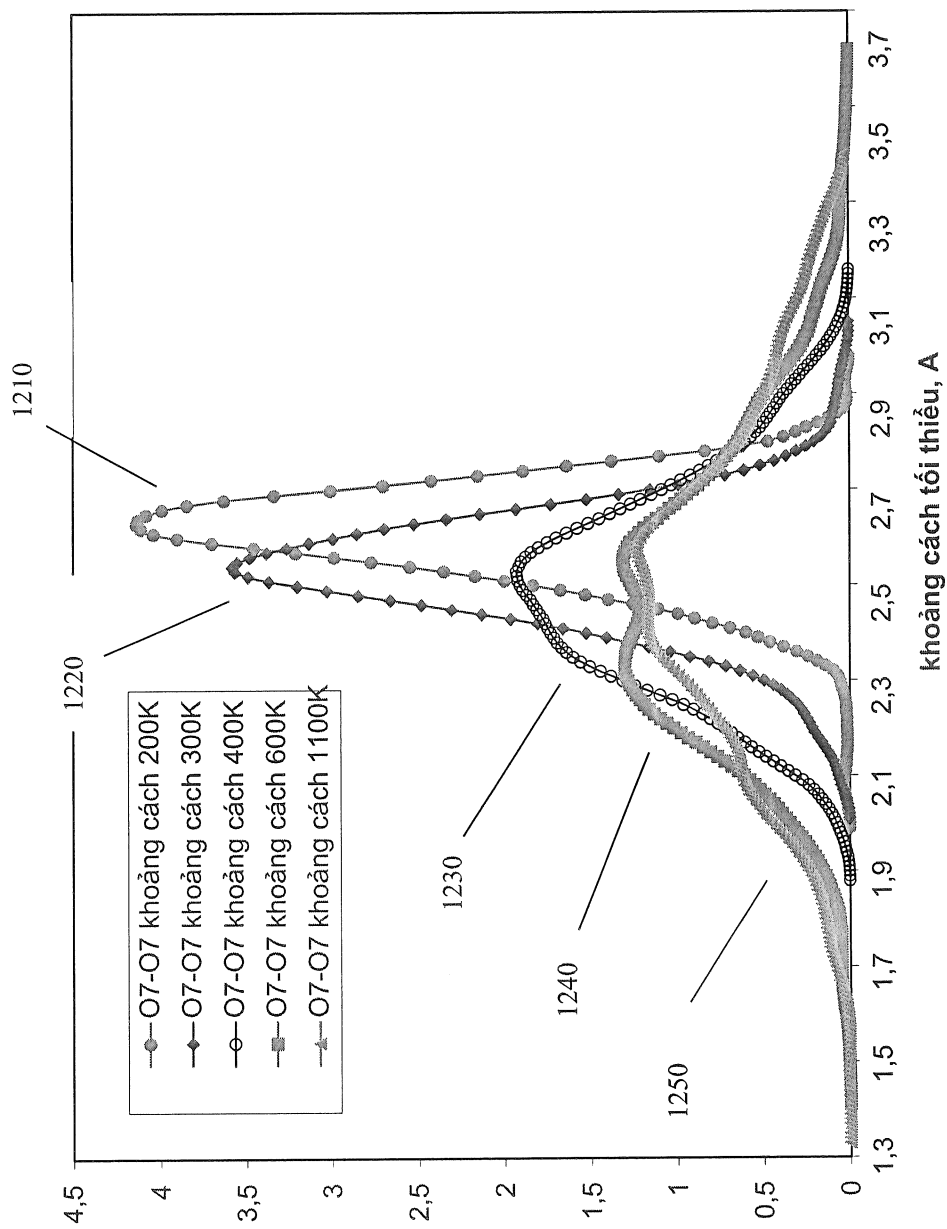


FIG. 12

Các đường đẳng nhiệt ITQ-55 (tất cả tại nhiệt độ 28°C)

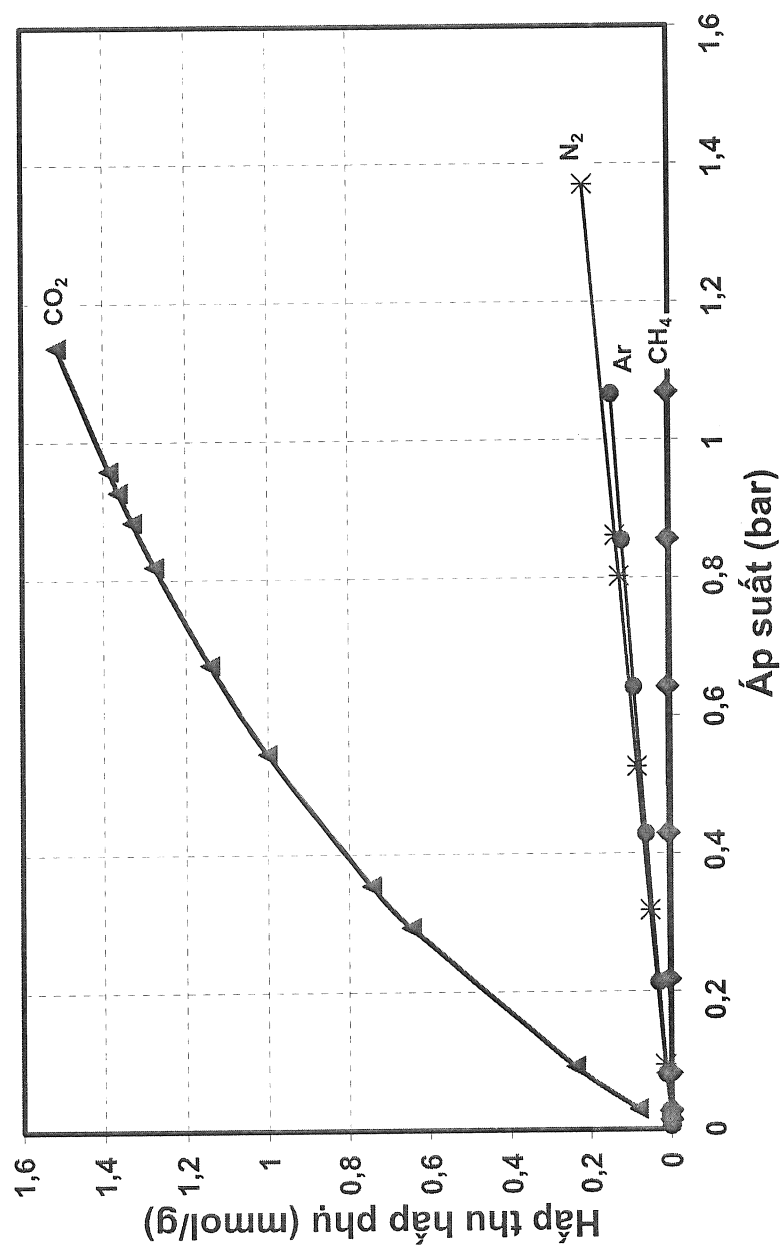


FIG. 13

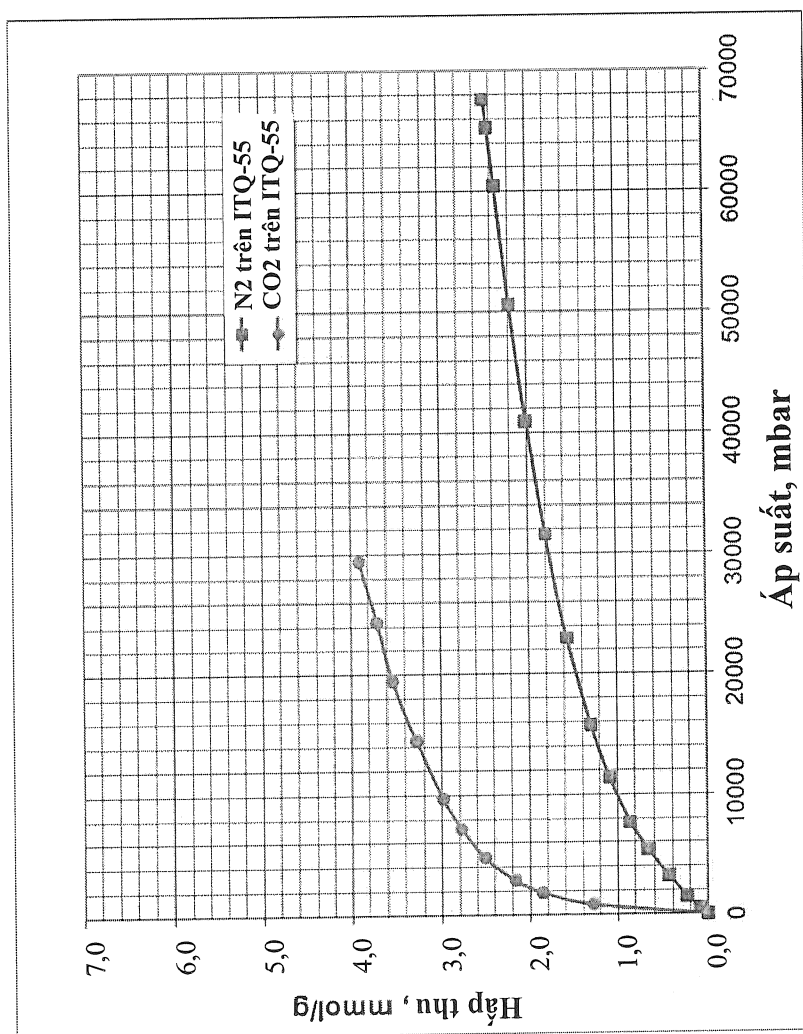


FIG. 14

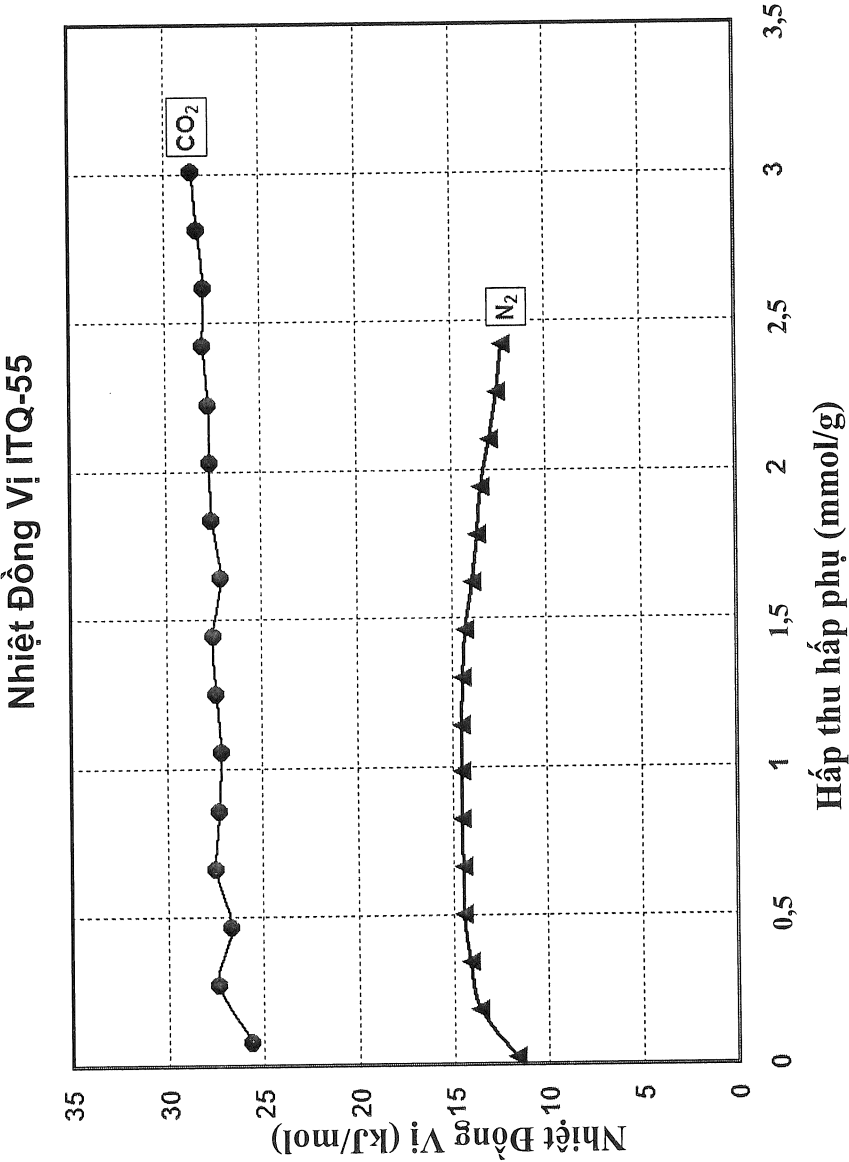


FIG. 15

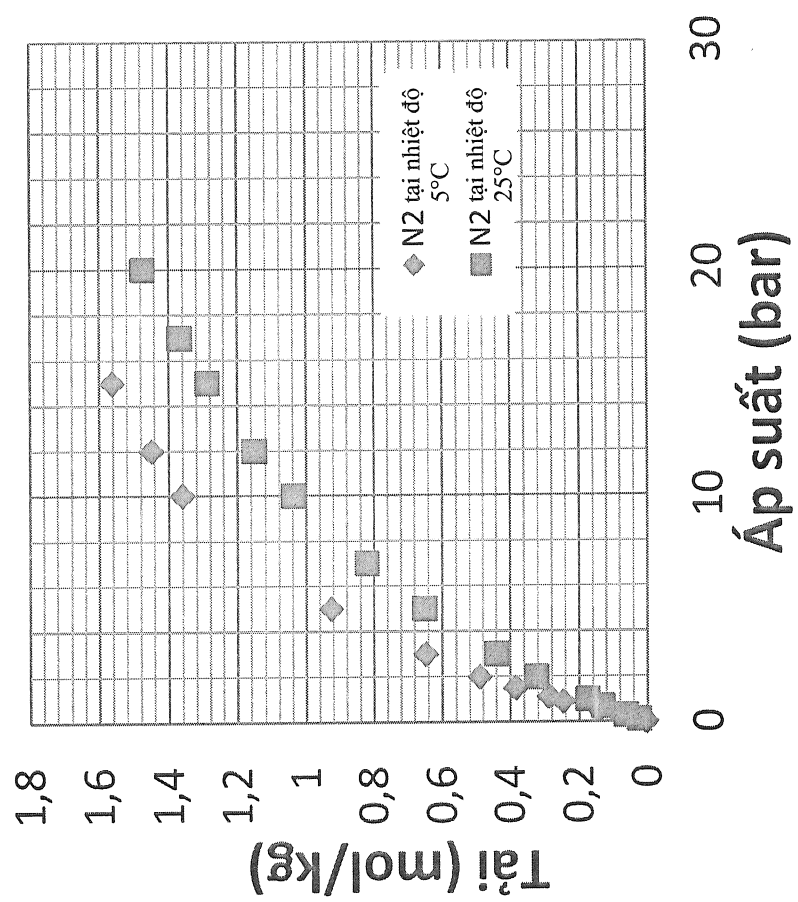


FIG. 16

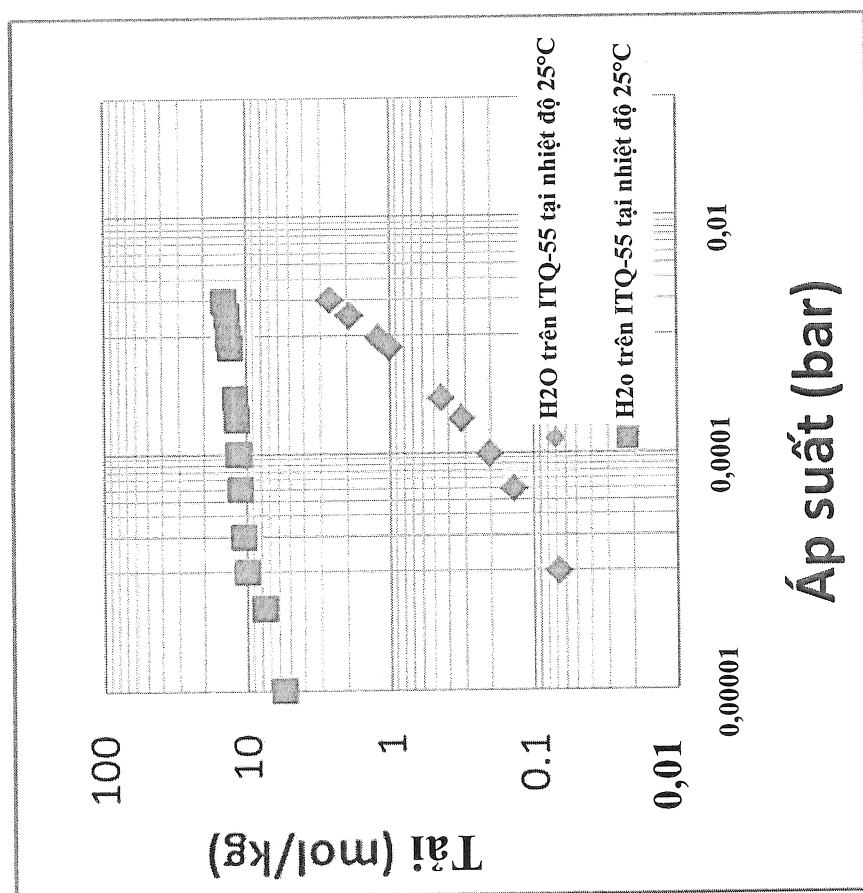


FIG. 17

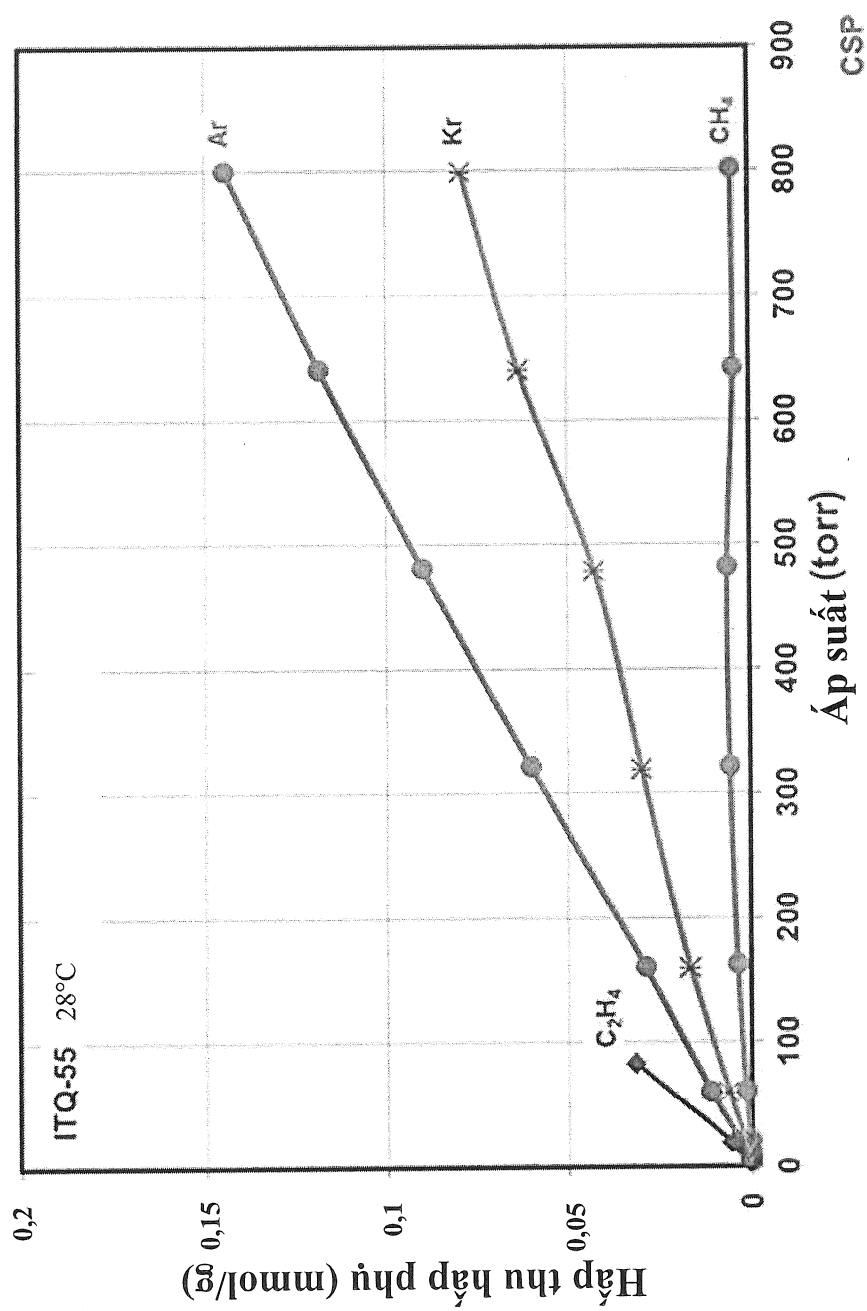


FIG. 18

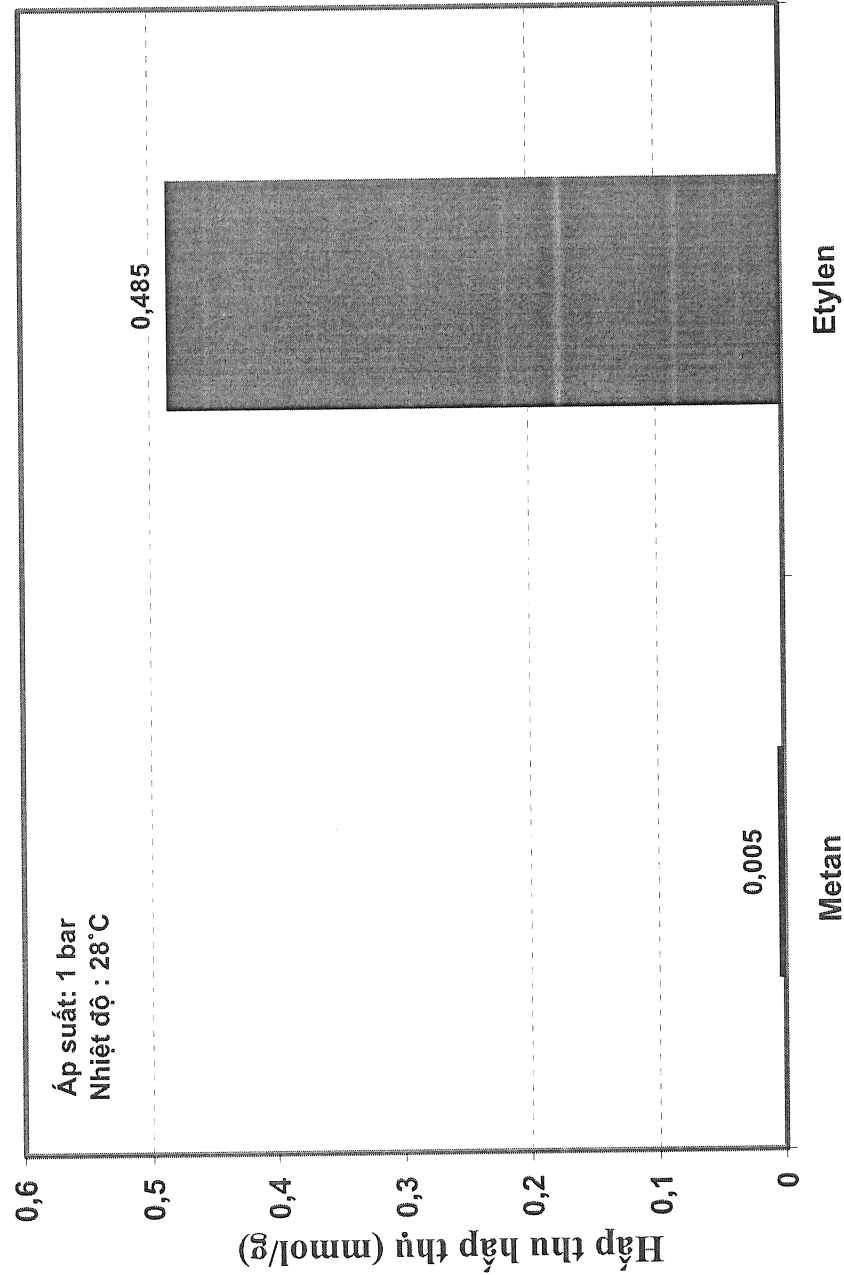


FIG. 19

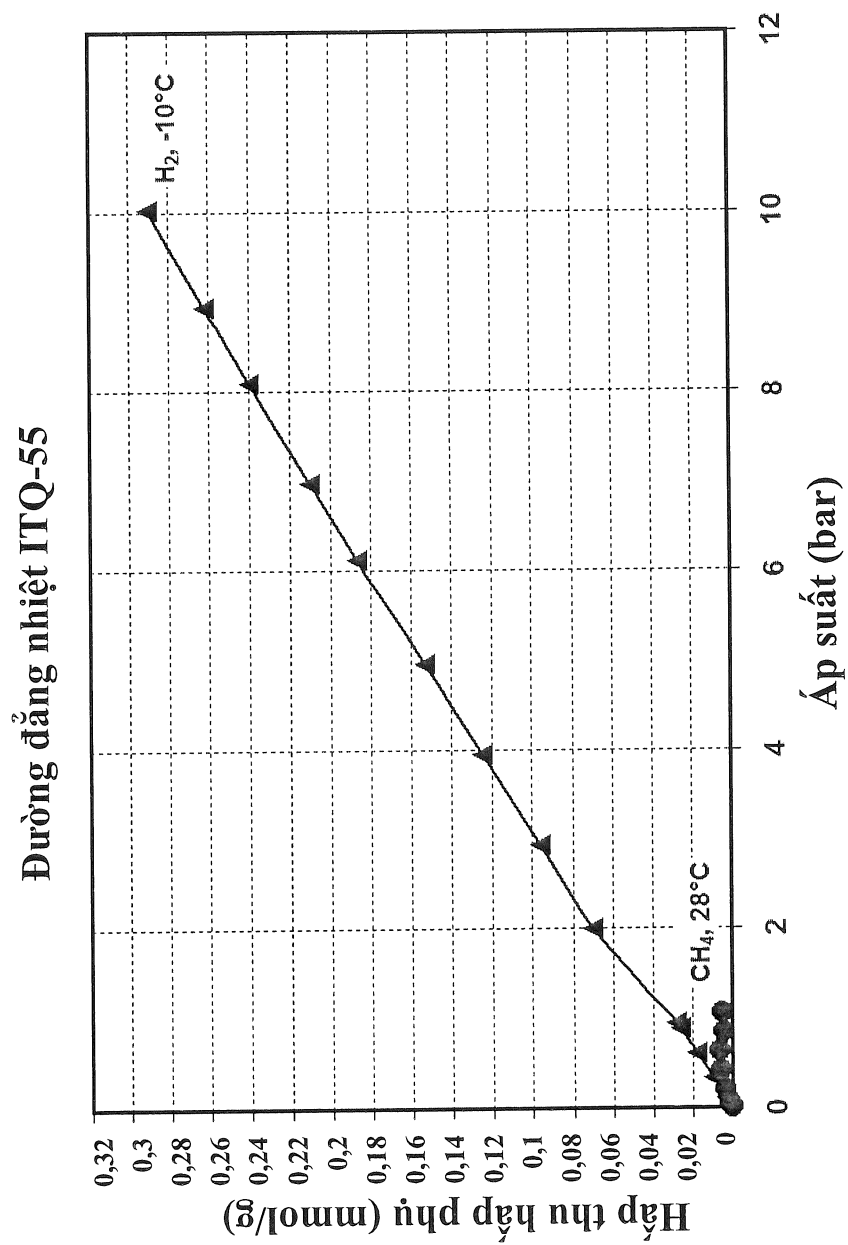


FIG. 20

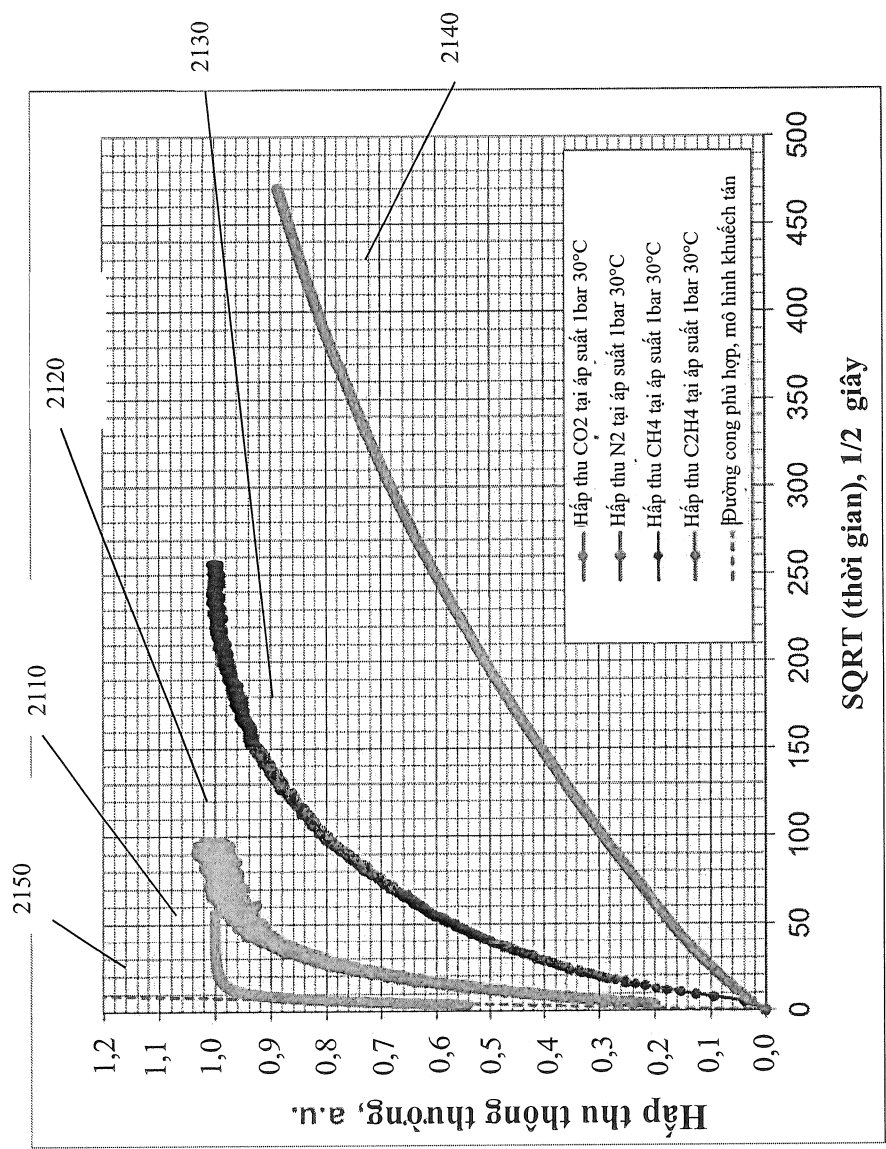


FIG. 21

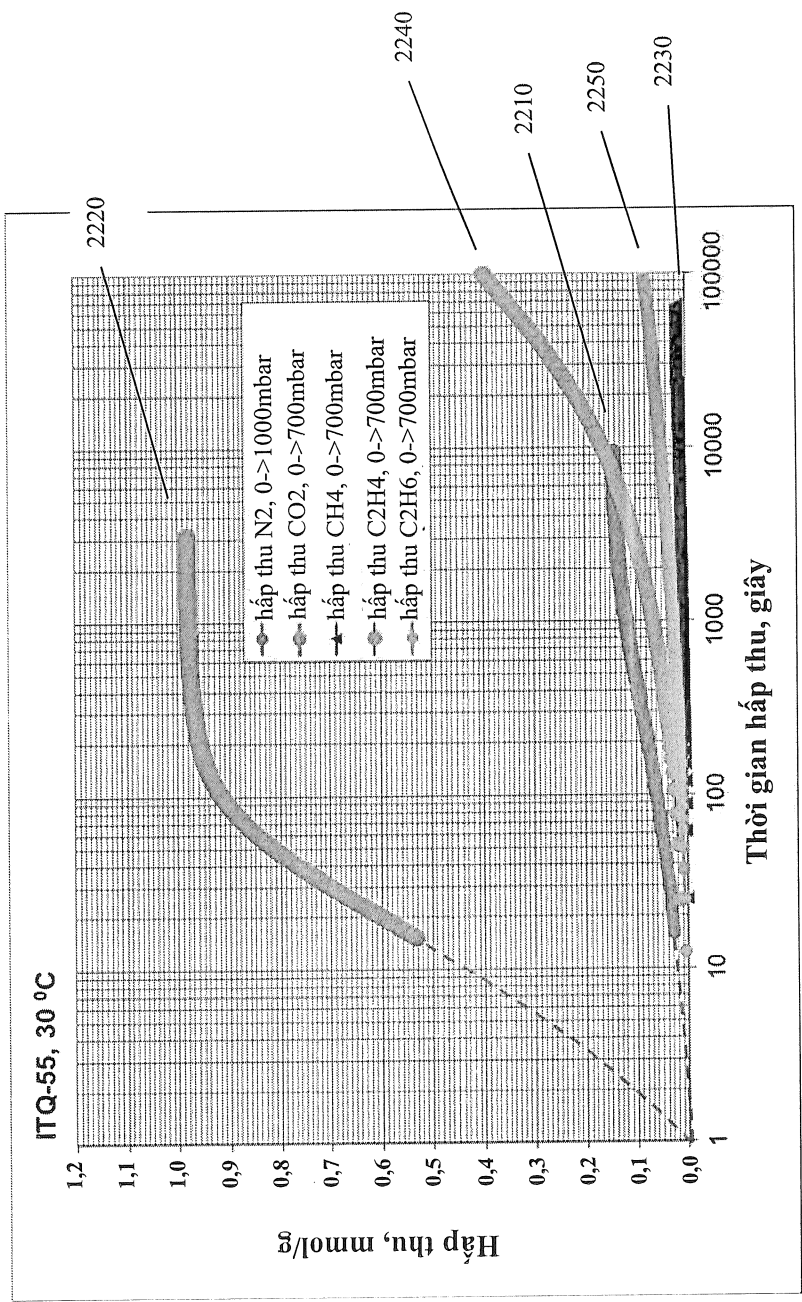


FIG. 22

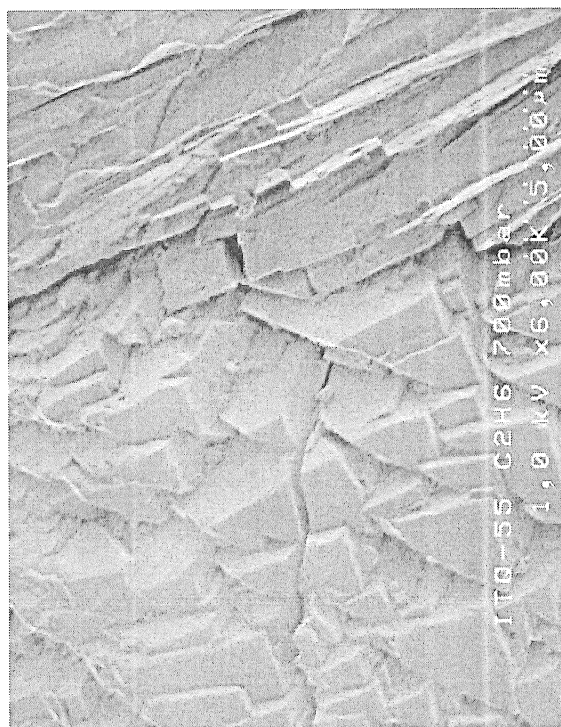


FIG. 23B

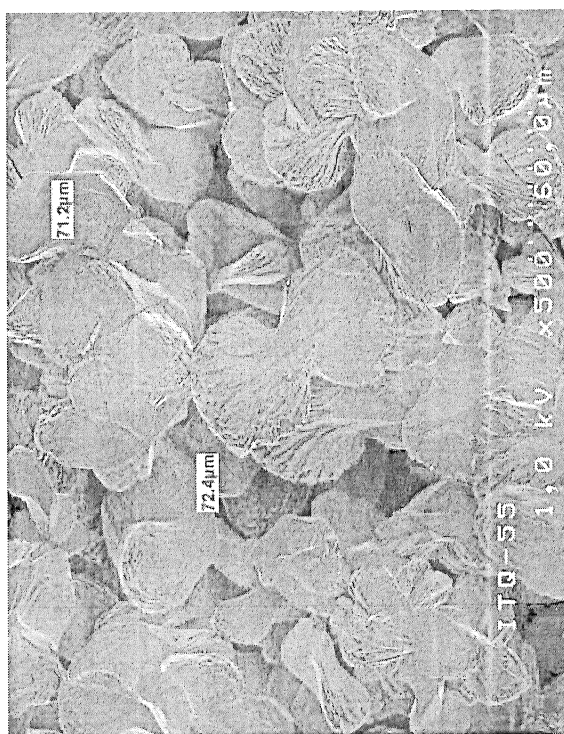


FIG. 23A

CO₂ trên ITQ-55: 0,1 bar
& 30°C

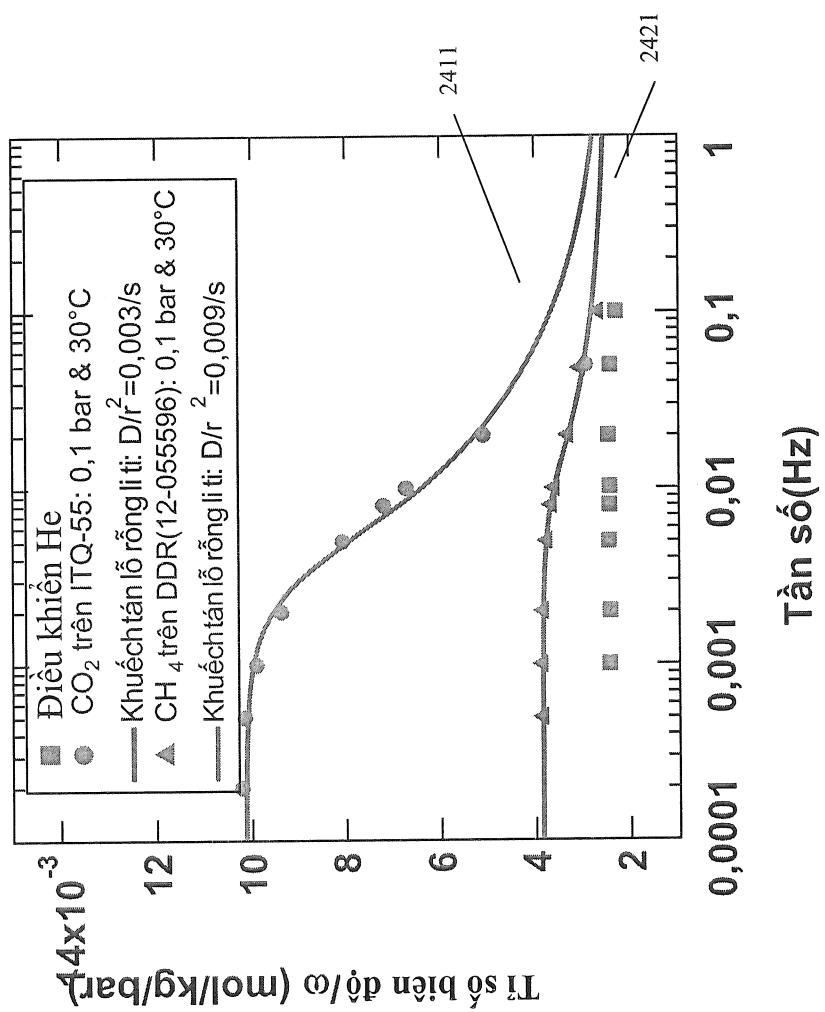


FIG. 24

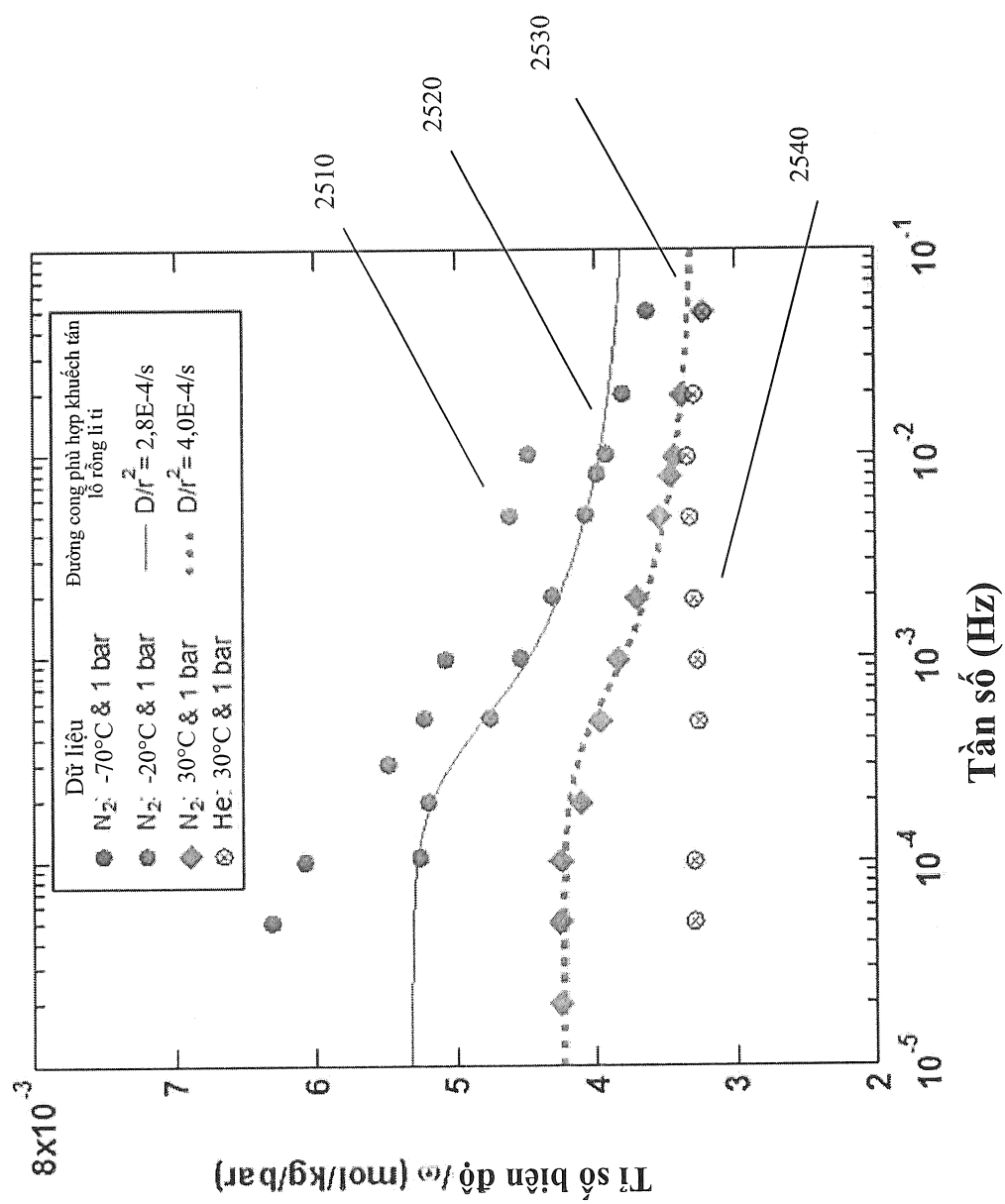


FIG. 25

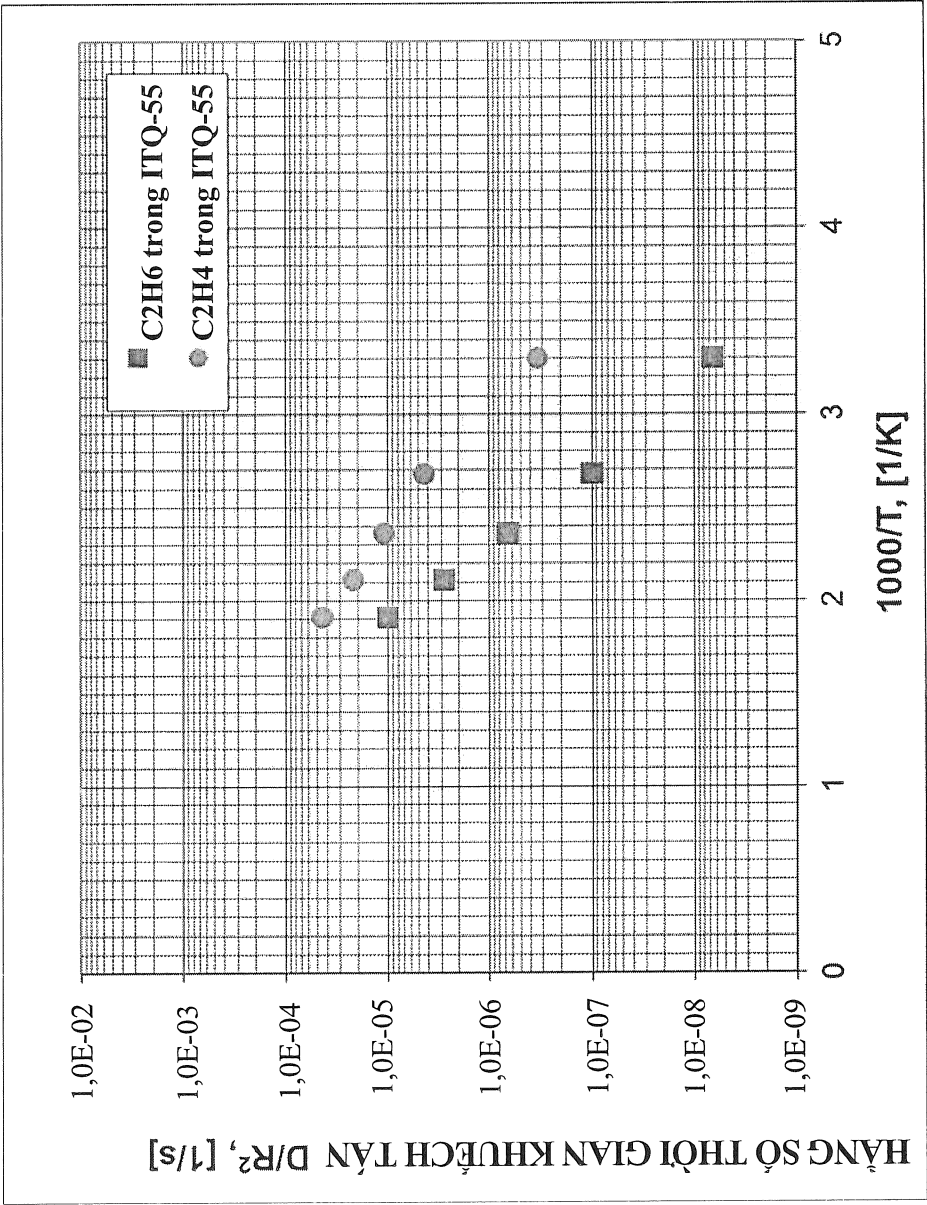


FIG. 26

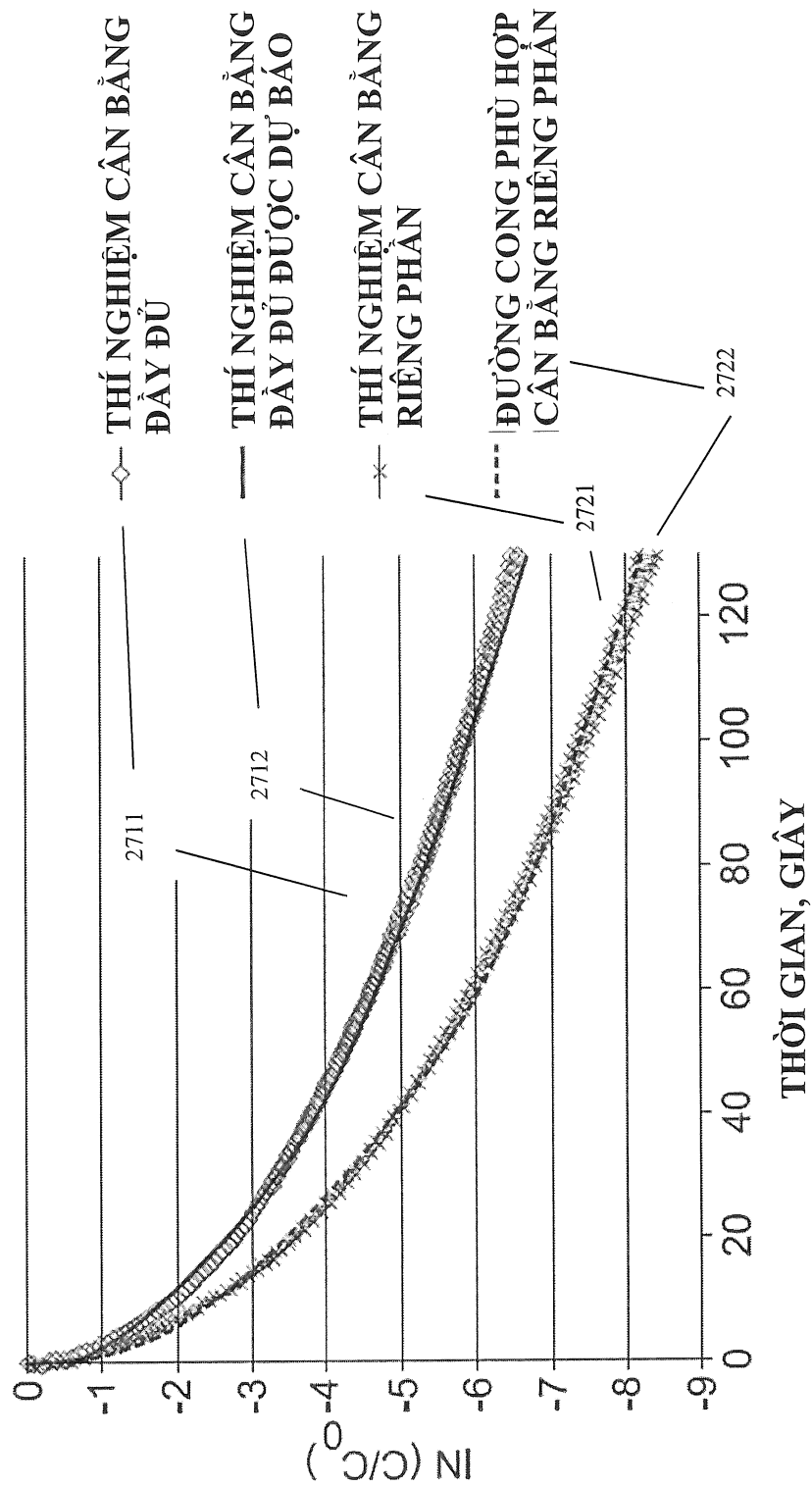


FIG. 27

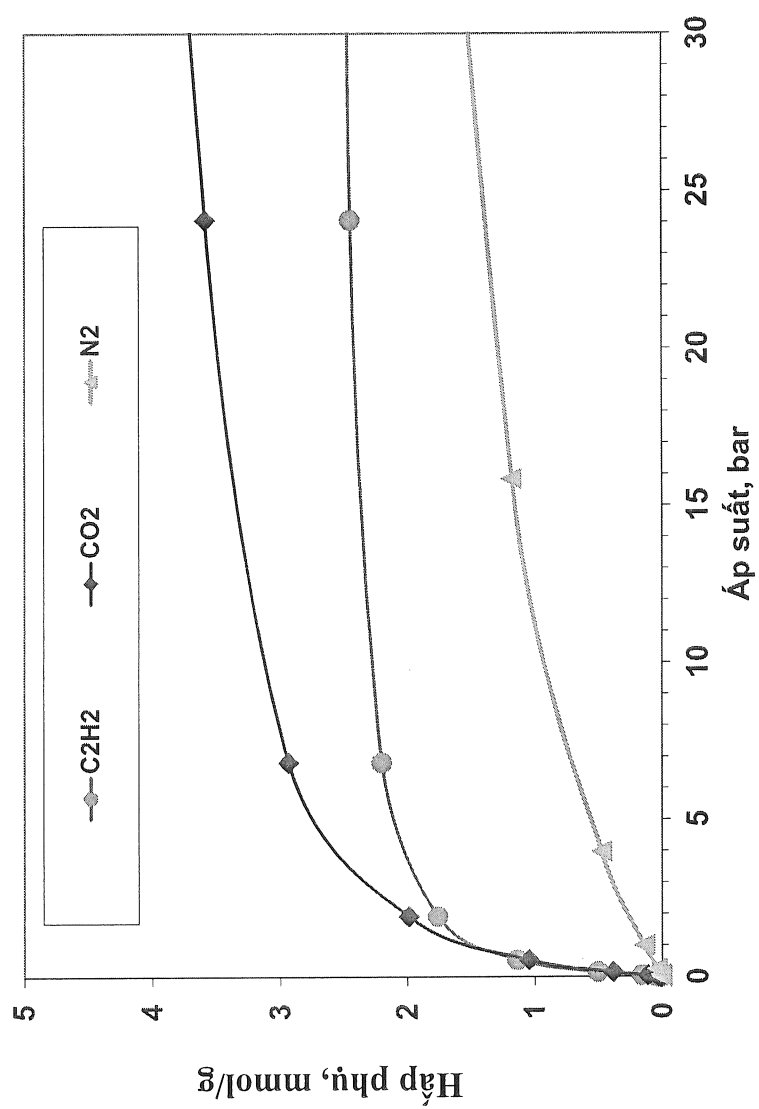


FIG. 28