

团 体 标 准

T/CIECCPA XXX—XXXX

固体二氧化碳吸附剂的性能指标 及测试方法

Performance indicators and testing methods of solid carbon dioxide adsorbents

（征求意见稿）

（在提交反馈意见时，请将您知道的相关专利连同支持性文件一并附上。）

XXXX-XX-XX 发布

XXXX-XX-XX 实施

中国工业节能与清洁生产协会 发布

CIECCCPA

目 次

前言.....II

1 范围.....1

2 规范性引用文件.....1

3 术语和定义.....1

4 测试要求.....2

 4.1 吸附容量的测试要求2

 4.2 吸附速率测试要求4

 4.3 吸附热（等温吸附线）测试要求.....5

 4.4 循环稳定性测试要求5

 4.5 吸附选择性测试要求6

5 测试内容.....7

 5.1 吸附容量测试内容7

 5.2 吸附速率测试内容7

 5.3 吸附热（等温吸附线）测试内容.....7

 5.4 循环稳定性测试内容7

 5.5 吸附选择性测试内容7

6 测试方法.....8

 6.1 吸附容量测试方法8

 6.2 吸附速率测试方法10

 6.3 吸附热（等温吸附线）测试方法.....10

 6.4 循环稳定性测试方法11

 6.5 吸附选择性的测试方法12

7 测试报告.....14

前 言

本文件按照 GB/T 1.1—2020《标准化工作导则 第1部分：标准化文件的结构和起草规则》的规定起草。

请注意本文件的某些内容可能涉及专利。本文件的发布机构不承担识别专利的责任。

本文件由中国工业节能与清洁生产协会提出并归口。

本文件起草单位：西安热工研究院有限公司、哈尔滨工业大学、哈电集团中央研究院。

本文件主要起草人：。

本文件为首次发布。

固体二氧化碳吸附剂的性能指标及测试方法

1 范围

本文件规定了固体二氧化碳吸附剂的测试要求、测试内容、测试方法和测试报告。
本标准适用于固体二氧化碳吸附剂的吸附性能量化与评价。

2 规范性引用文件

下列文件中的内容通过文中的规范性引用而构成本文件必不可少的条款。其中，注日期的引用文件，仅该日期对应的版本适用于本文件；不注日期的引用文件，其最新版本（包括所有的修改单）适用于本文件。

GB/T 23938-2021 高纯二氧化碳

GB/T 8980-2005 高纯氮

GB/T 3864-2016 高纯氦

3 术语和定义

下列术语和定义适用于本文件

3.1

吸附剂 adsorbent

用于从气体或液体中吸附某些成分的固态物质，主要包括活性炭、分子筛、金属有机骨架（MOFs）等多孔材料；钙基、钾基、钠基及镁基等高温/中温吸附材料以及有机/无机复合吸附材料等。

3.2

吸附质 adsorbate

被吸附剂所吸附的物质，主要指吸附过程中的吸附目标物。

3.3

化学吸附 chemical adsorption

吸附质分子与固体表面原子（或分子）发生电子的转移、交换或共有，形成吸附化学键的吸附。

3.4

物理吸附 physical adsorption

吸附质和吸附剂分子间存在范德华力所引起的吸附，也称范德华吸附。

3.5

标准测试气 **standard test gas**

用于测量评价固体吸附剂对吸附质（CO₂）吸收性能的一种温度、压力、组分恒定的气体。

3.6

吸附容量 **adsorption capacity**

在一定的温度和标准测试气条件下，单位质量的吸附剂在足量标准测试气中放置足够时间，所能吸收的最大吸附质（CO₂）量，单位为 mmol/g 或者 mg/g。

3.7

吸附速率 **adsorption rate**

在一定的温度和标准测试气条件下，单位质量的吸附剂在单位时间内吸附的吸附质（CO₂）的量，单位为 mmol/s 或者 mg/s。

3.8

吸附热 **adsorption heat**

在一定的温度和标准测试气条件下，单位量吸附质（CO₂）分子移向固体吸附剂表面时释放的热量，分为物理吸附热与化学吸附热，单位为 kJ/mol 或 kJ/kg。

3.9

吸附选择性 **adsorption selectivity**

吸附剂因其组分、结构不同，在一定的温度和标准测试气条件下，所显示出来的对某些物质优先吸附的能力。

3.10

静态 **static**

在吸附剂性能测试过程中，标准测试气与吸附剂间相对静止。

3.11

吸附等温线 **adsorption isotherm**

在一定温度条件下，通过吸附剂性能静态测试获得的，吸附容量随压力变化曲线

3.12

动态 **dynamic**

在吸附剂性能测试过程中，标准测试气持续流过吸附剂。

3.13

穿透曲线 **penetration curve**

在吸附剂性能动态测试过程中，流过吸附剂的测试气中吸附质浓度随时间变化曲线。

4 测试要求

4.1 吸附容量的测试要求

4.1.1 静态容量法测量吸附容量（等温吸附线）测试要求

4.1.1.1 试剂与材料的要求

为了确保测试结果的精确度，待测吸附剂样品的质量 $\geq 0.1\text{g}$ ；

测试用的吸附气体以及标定用的氦气，纯度 $\geq 99.999\%$ 。

CO_2 样气，纯度指标符合 GB/T 23938-2021，推荐值 99.99%；

N_2 样气，纯度指标符合 GB/T 8980-2005，推荐值 99.999%；

He 样气，纯度指标符合 GB/T 3864-2016，推荐值 99.999%；

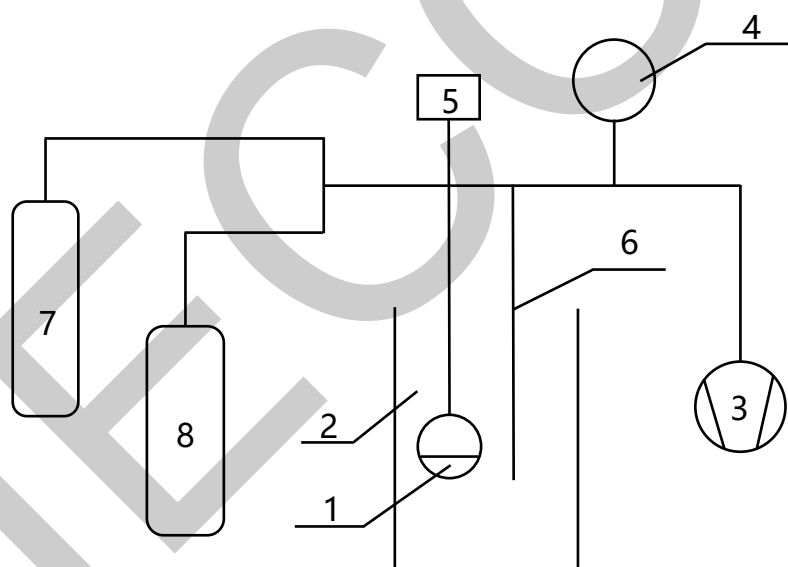
标准测试气：

1) 纯 CO_2 ，其中 CO_2 样气含量 99.999%；

2) 模拟干烟气，其中 O_2 样气含量 6%、 CO_2 样气含量 15%、 N_2 样气含量 79%。

4.1.1.2 仪器与设备的要求

静态容量法测试装置由容积腔（体积测量误差 $\leq 0.1\%$ ）、样品室（耐压 $\geq 200\text{ kPa}$ ，材质 316L 不锈钢）、恒温水浴（控温范围 $0\text{--}100^\circ\text{C}$ ，波动 $\leq 0.1^\circ\text{C}$ ）、高精度压力传感器（分辨率 1 Pa ）、真空泵、气动阀以及计算机和控制系统组成，其示意图见图 4-1。所用仪器设备包括但不限于加热炉（温度范围 $50\text{--}300^\circ\text{C}$ ，温控精度 $\pm 1^\circ\text{C}$ ）与分析天平（感量为 0.1 mg ）。



标引序号说明：

1—样品；2—低温杜瓦；3—真空泵系统；4—压力计（压力传感器）；5—校准体积（气体定量管）；

6—饱和蒸汽压测定管；7—吸附气体；8—死体积测定气体（He）

图 1 静态容量法测试装置

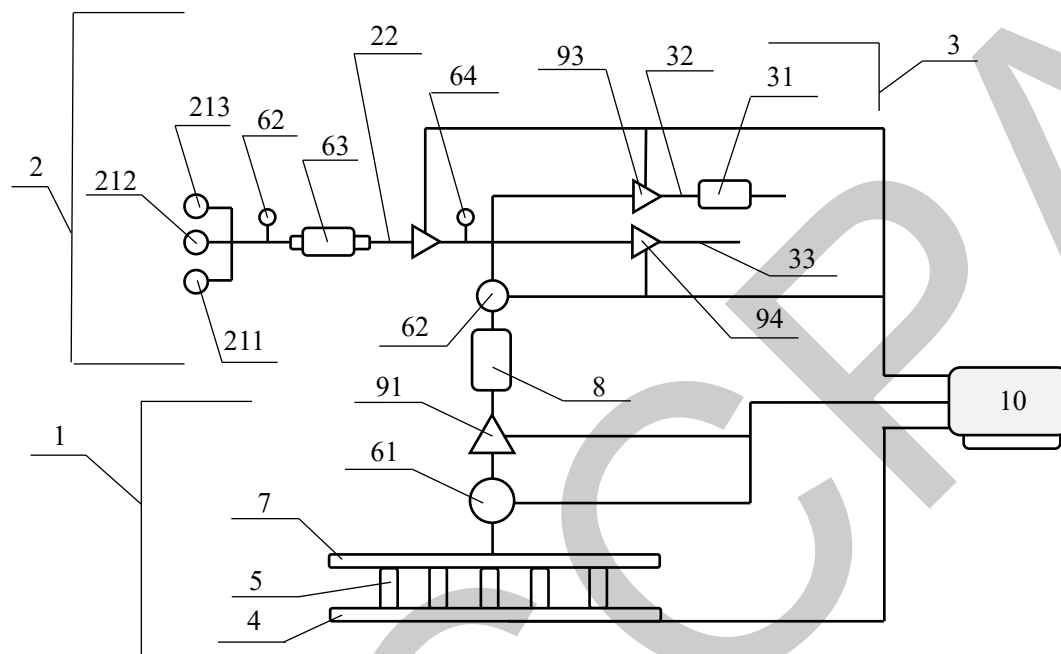
4.1.2 静态重量法测量吸附容量的测试要求

4.1.2.1 试剂与材料的要求

同 4.1.1.2 条，样品质量 $\geq 10\text{ g}$ 。

4.1.2.2 仪器与设备的要求

静态重量法测量装置由高精度天平（感量为 0.1mg）、恒温箱（控温 20–100°C±1°C）、真空泵、样品罐（容积≥50 mL，耐压 200 kPa）、压力表、控制系统以及气源组成，测试装置与原理图如图 2 所示。



标引序号说明:

1—恒温箱；2—注气系统；3—抽气系统；4—高精度天平；5—样品罐；7—分配管；8—参考罐 10—控制系统；21—气源部；22—注气管路；23—增压泵；31—真空泵；32—抽气管路；33—泄压排气支路；61—第一温压传感器；62—第二温压传感器；63—第一压力表；64—第二压力表；91—第一阀门；92—第二阀门；93—第三阀门；94—第四阀门；211—氮气源；212—CO₂气源；213—氦气源

图 2 静态重量法测试装置

4.2 吸附速率测试要求

4.2.1 试剂与材料的要求

吸附剂，为了确保测试结果的精确度，待测样品的质量应该 ≥ 50 mg;

CO₂样气，纯度指标参考 GB/T 23938-2021，推荐值 99.99%；

N₂ 样气，纯度指标参考 GB/T 8980-2005，推荐值 99.999%;

He 样气，纯度指标参考 GB/T 3864-2016，推荐值 99.999%；

标准测试气:

- 1) 纯 CO₂, 其中 CO₂样气含量 100%;
- 2) 模拟干烟气, 其中 O₂样气含量 6%、CO₂样气含量 15%、N₂样气含量 79%。

4.2.2 仪器与设备的要求

- 1) 吸附柱: 填充待测样品。

2) 质量流量控制器：流量控制范围 $1.67 \times 10^{-9} \text{ m}^3/\text{s}$ - $8.3 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{s}$ ，不确定度 $\pm 0.1\%$ 满量程。

3) 质谱仪：载气成分含量测定，分析不确定度 1-3%。

4) 恒温室：控制测试温度。

4.3 吸附热（等温吸附线）测试要求

4.3.1 试剂与材料的要求

为了确保测试结果的精确度，待测样品的质量应该 $\geq 50 \text{ mg}$ 。

CO₂ 样气，纯度指标参考 GB/T 23938-2021，推荐值 99.99%；

N₂ 样气，纯度指标参考 GB/T 8980-2005，推荐值 99.999%；

He 样气，纯度指标参考 GB/T 3864-2016，推荐值 99.999%；

标准测试气：

1) 纯 CO₂，其中 CO₂ 样气含量 100%；

2) 模拟干烟气，其中 O₂ 样气含量 6%、CO₂ 样气含量 15%、N₂ 样气含量 79%。

4.3.2 仪器与设备的要求

1) 高压吸附仪

2) 高精度天平：感量为 0.1mg。

3) 恒温水浴。

4.4 循环稳定性测试要求

4.4.1 动态法的测试要求

4.4.1.1 试剂与材料的要求

吸附剂，为了确保测试结果的精确度，待测样品的质量应该 $\geq 10 \text{ g}$ ；

CO₂ 样气，纯度指标符合 GB/T 23938-2021，推荐值 99.99%；

N₂ 样气，纯度指标符合 GB/T 8980-2005，推荐值 99.999%；

He 样气，纯度指标符合 GB/T 3864-2016，推荐值 99.999%；

标准测试气：

1) 纯 CO₂，其中 CO₂ 样气含量 100%；

2) 模拟干烟气，其中 O₂ 样气含量 6%、CO₂ 样气含量 15%、N₂ 样气含量 79%。

4.4.1.2 仪器与设备的要求

1) 电热恒温干燥箱，0°C-300°C

2) 基于重量法测定材料二氧化碳吸附容量的实验装置。

3) 天平，测量范围 120g，分度值 0.0001g。

4.4.2 静态法的测试要求

4.4.2.1 试剂与材料的要求

吸附剂，为了确保测试结果的精确度，待测吸附剂样品的质量应该 $\geq 0.1 \text{ g}$ ；

CO₂ 样气，纯度指标符合 GB/T 23938-2021，推荐值 99.99%；

N₂ 样气，纯度指标符合 GB/T 8980-2005，推荐值 99.999%；

He 样气，纯度指标符合 GB/T 3864-2016，推荐值 99.999%；

标准测试气：

- 1) 纯 CO₂，其中 CO₂ 样气含量 100%；
- 2) 模拟干烟气，其中 O₂ 样气含量 6%、CO₂ 样气含量 15%、N₂ 样气含量 79%。

4.4.2.2 仪器与设备的要求

- 1) 电热恒温干燥箱，0℃-300℃。
- 2) 基于容量法测定材料二氧化碳吸附容量的实验装置。
- 3) 天平，测量范围 120g，分度值 0.0001g。

4.5 吸附选择性测试要求

4.5.1 一步法的测试要求

4.5.1.1 试剂与材料的要求

吸附剂，为了确保测试结果的精确度，待测吸附剂样品的质量应该≥0.1g；

二氧化碳，浓度为 99.99%；

氮气，浓度为 99.99%；

氦气，浓度为 99.99%。

4.5.1.2 仪器与设备的要求

- 1) 电热恒温干燥箱，0℃-300℃
- 2) 基于一歩法测定材料二氧化碳吸附选择性的实验装置，见图 3 所示。

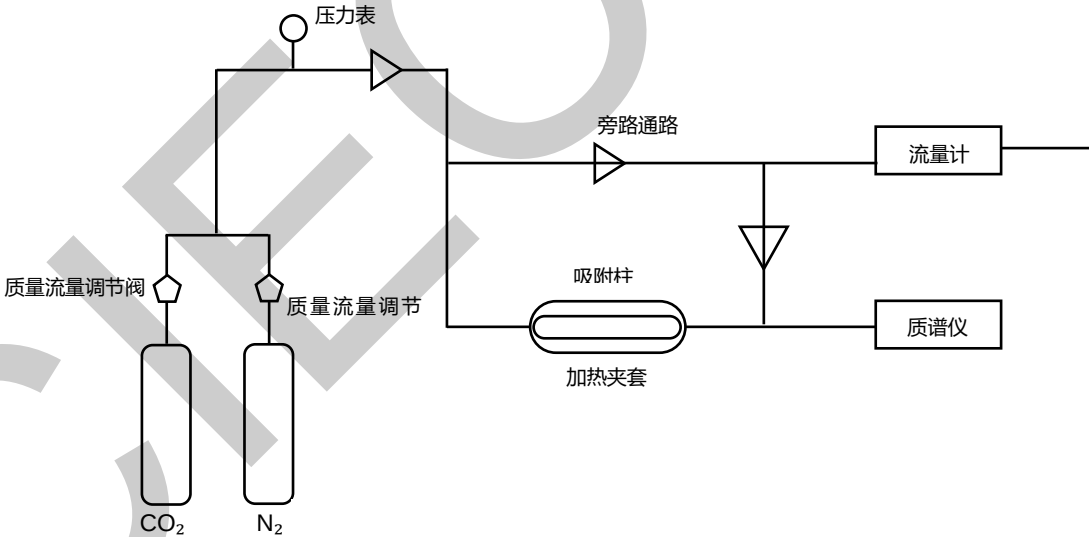


图 3 吸附选择性测试装置

- 3) 天平，测量范围 120g，分度值 0.0001g。

4.5.2 两步法的要求

4.5.2.1 试剂与材料的要求

吸附剂，为了确保测试结果的精确度，待测吸附剂样品的质量应该≥0.1g；

二氧化碳，浓度为 99.99%；

氮气，浓度为 99.99%；

氦气，浓度为 99.99%。

4.5.2.2 仪器与设备要求

- 1) 电热恒温干燥箱，0°C-300°C。
- 2) 气体吸附装置。
- 3) 天平，测量范围 120g，分度值 0.0001g

5 测试内容

5.1 吸附容量测试内容

5.1.1 静态容量法测量吸附容量（等温吸附线）测试内容

基于理想气体状态方程 $pV=nRT$ 进行分析测量，通过测量固定容积腔（体积已知）与样品室（体积未知）的压力变化，标定样品室体积；根据充入吸附质气体前后的压力差及温度，计算吸附量。

5.1.2 静态重量法测量吸附容量测试内容

通过高精度天平直接测量吸附平衡时吸附剂的质量增量，扣除气相浮力影响后计算吸附量。

5.2 吸附速率测试内容

当在装有吸附剂样品的固定床穿透柱中通入含有吸附质气体的载气时，吸附质气体被吸收，一段时间后，仅有载气从柱中流出。吸附剂开始吸附吸附质，慢慢达到饱和，在饱和点，吸附质开始从柱出口端出现。根据饱和点出现的时间与出口处的浓度曲线即可计算吸附速率。

5.3 吸附热（等温吸附线）测试内容

获取吸附热数据的经典方法是基于克劳修斯-克拉珀龙（Clausius-Clapeyron）方程，使用一系列的等温吸附数据（至少两条不同温度下的吸附数据），进行计算而获得。

5.4 循环稳定性测试内容

5.4.1 动态法测试内容

经预处理的吸附剂，在一定条件下吸附二氧化碳，通过称量吸附前后的重量变化来确定吸附量，继而循环进行预处理、吸附过程，动态记录吸附剂质量的增重、失重过程，简称“重量法”。

5.4.2 静态法测试内容

经预处理的吸附剂，在一定条件下吸附二氧化碳，通过一定容积内吸附前后的压力变化，根据“理想气体状态方程”计算得到吸附量，继而循环进行预处理、吸附过程，简称“容量法”或“体积法”。

5.5 吸附选择性测试内容

5.5.1 一步法的测试内容

经预处理的吸附剂，装载在实验装置测试床层，在一定混合气条件下直接测定材料对二氧化碳的吸附选择性，即为一步法。

5.5.2 两步法的测试内容

分别测定吸附剂在二氧化碳、氮气气氛下的吸附等温线，将吸附等温线进行拟合，继而代入经验公式计算其吸附选择性，即为两步法。

6 测试方法

6.1 吸附容量测试方法

6.1.1 静态容量法测量吸附容量测试方法

6.1.1.1 静态容量法测量吸附容量测试步骤

1) 在实验前对吸附剂进行称重，先单独称量样品管的质量 $m_a(g)$ ，称取一定量的样品，通过漏斗倒入样品管中，记录装填样品后的样品室质量 $m_b(g)$ ，计算两者的差值，记录装填的样品质量 $m_1 = m_b - m_a(g)$ 。

2) 由于样品在装填和放置时会吸附杂质气体，需要在实验前进行脱气处理，通过电加热器，将样品管加热到适宜的脱附温度脱附 6 h，脱附的同时开启真空泵，将样品管内抽至真空。冷却后称量脱附后的样品管质量 $m_c(g)$ ，得到脱附后的样品质量 $m_2 = m_c - m_a(g)$ 。后续表征测试都以样品脱附后的质量为准。

3) 称重后的样品管装至测试位，抽真空，设定测试温度，待水浴温度平衡后，标定样品管体积。在实验开始前将系统抽至真空，已知容积腔 5 的校准体积为 $V_0(L)$ ，关闭样品室 1 与容积腔 5 之间的阀门。向容积腔加入标定用氢气，当压力计 4 的读数稳定后记录为 $P_1'(Pa)$ 。由于体积已知，可以由压力得知加入的气体体积，再联通样品室，打开样品室 1 与容积腔 5 之间的阀门，氢气向样品室扩散，待压力平衡后，记录压力传感器 4 的读数 $P_2'(Pa)$ 。根据理想气体状态方程，可以计算得到样品室 1 的体积 $V_1(L)$ ，经过多次标定，得到 V_1 的准确值。

4) 通过真空泵将系统内的氢气抽尽，随后关闭样品室 1 与容积腔 5 之间的阀门，向容积腔 5 内充入微量的测试气体 (CO_2)，当压力计 4 的读数稳定后记录为 P_1 ，记录恒温室 2 内的温度 T 。随后打开样品室 1 与容积腔 5 之间的阀门，测试气体向样品室扩散并被吸附，待压力平衡后，记录压力传感器 4 的读数 P_2 。根据理想气体状态方程，计算得到压力为 P_2 时样品室 1 内的吸附量 $n (mmol)$ ，从待测气体释放进入 5 的气体体积应进行提前计算，此时平衡压力 P_2 显著低于 P_1 。通过气动阀控制释放微量气量，并且分成多次充入气体。第一次吸附平衡后，预估出吸附平衡后压力与容积腔 5 初始压力的关系。吸附等温线的取点不得少于 10 点，基于上述预估规律，分多次充入微量气体，使得平衡压力逼近设定测试压力。

根据上述的原理与方法进行吸附测试。根据设定的平衡压力值，测量设定点的吸附

量 n_1 、 n_2, 将吸附量除以样品质量, 绘制出质量吸附量 vs 压力的吸附等温线。

6.1.1.2 测试结果计算方法

样品室和空余死体积的计算方式如下:

$$V_1 = \frac{(P_1' - P_2') \cdot V_0}{P_2'}$$

第 i 步吸附增量 Δn_i (mmol) 的计算方式如下:

$$\Delta n_i = \frac{p_{1,i} \cdot V_0}{R \cdot T_i} - \frac{p_{2,i} \cdot (V_0 + V_1)}{R \cdot T_i}$$

式中:

$p_{1,i}$ ——充气压力, Pa;

$p_{2,i}$ ——平衡压力, Pa;

T_i ——平衡温度, K;

R ——理想气体常数, 8.314J/(mol·K)。

累计吸附量计算方式如下 (k 为测试点数, k 不小于 10 次):

$$n_{total} = \sum_{i=1}^k \Delta n_i$$

每次向容积腔内加入微量气体, 将单次的吸附增长量积分求和, 可以得到更为准确的吸附等温线。

6.1.2 静态重量法测量吸附容量测试方法

6.1.2.1 静态重量法测量吸附容量测试步骤

1) 根据天平的精度范围, 样品的重量, 样品的预估吸附量, 称量一定量的样品加入样品室。样品因吸附引起的质量变化应该大于天平的精度等级, 例如 0.5g 的样品, 预估吸附量为 0.05g, 天平的精度范围应该高于 0.001g。

2) 将测试系统抽至真空, 将高精度天平清零, 关闭抽气系统, 连通注气系统和样品罐, 通过增压泵向样品罐内注入自由空间标定气(He), 其充入压力由低到高, 记录实验压力点样品罐内的自由空间测定气的质量、实验温度和实验压力, 计算得出自由空间体积;

3) 关闭注气系统, 连通抽气系统和样品罐, 排空注气管路和样品罐气体并通过抽气系统抽真空; 关闭抽气系统, 连通注气系统和样品罐, 通过增压泵向样品罐内注入吸附气体至设定的吸附压力点, 吸附平衡后称量, 记录样品罐内的吸附气体的总质量、温度和压力, 完成吸附测试, 计算得出吸附量。

4) 根据天平的质量变化, 自由空间体积引起的质量变化, 可以计算出不同压力条件下的吸附量, 再绘制出对应的吸附等温线。

6.1.2.2 结果计算方法

在 6.1.2.1 中步骤 2) 中, 根据压力变化导致的密度变化 $\rho_p(\text{g/cm}^3)$ 和天平测得质量 $m_f(\text{g})$

的变化，可以测得自由空间体积：

$$V_f = \frac{m_f}{\rho_p}$$

而在步骤 3)中，根据天平测得的质量 m_r (g)，对应压力下测试气体的密度 ρ_p (g/cm³)，自由空间体积 V_f (cm³)可以计算出此时的吸附质量：

$$m_{ads} = m_r - \rho_p V_f$$

在对应压力下，吸附剂单位质量的吸附量 n (mmol/g)可以根据样品质量 m_{ad} (g)和气体的分子量 M (g/mol)计算得到：

$$n = \frac{m_{ads}}{(M \cdot m_{ad})}$$

继而根据吸附量 n 和压力 P 绘制出对应温度下的吸附等温线

6.2 吸附速率测试方法

6.2.1 吸附速率测试步骤

- 1) 将样品装入样品管，通入 200℃惰性载气氮气脱气。
- 2) 冷却到测试温度。
- 3) 通入恒定质量流量的混合气体（15%的 CO₂ 和 75%的氮气）。
- 4) 通过红外气体传感器记录出口处二氧化碳的浓度，直到吸附平衡达到穿透点。

6.2.2 结果计算方法

根据穿透曲线，前段为完全吸附区，中间段为穿透区，末端属于饱和区。根据穿透区域的吸附曲线拟合动力学参数 k 。

$$t = \tau + \frac{1}{k} \ln\left(\frac{\rho}{\rho_0 + \rho}\right)$$

式中：

ρ_0 ——入口质量浓度，mg/L；

ρ ——出口质量浓度，mg/L；

t ——柱吸附时间，min；

k ——吸附速率常数，min⁻¹；

τ ——50%穿透时间，min。

6.3 吸附热（等温吸附线）测试方法

6.3.1 吸附热测试步骤

1) 利用静态容量法（详细步骤参照 6.1.1.1）或静态重量法（详细步骤参照 6.1.2.1）获得样品在不同温度下的多条等温吸附曲线。

2) 取不同温度下的相同吸附量 n_0 时的压力 P 。

6.3.2 结果计算

根据克劳修斯-克拉珀龙方程：作出 10 个吸附体积（吸附量）下的 $\ln(P)$ vs. $1/T$ 等量图

$$-\Delta H = \left(-R \frac{\partial \ln P}{\partial \frac{1}{T}}\right)$$

式中：

ΔH ——吸附热，J/mol;

R ——理想气体常数，8.314J/(mol*k);

P ——平衡压力，kPa;

T ——平衡温度，k。

6.4 循环稳定性测试方法

6.4.1 动态法测试循环稳定性

6.4.1.1 动态法循环稳定性测试步骤

1) 预处理，恒定流速的惰性气体（ N_2 、 He ）吹扫，腔室升温至 200℃恒温处理 1-3 h，然后降温至目标温度（即测试的温度条件）。

2) 吸附过程，将气流切换至相应分压条件的 CO_2 混合气体，实时记录样品的重量变化，直至重量不再变化。

3) 再生过程，将气流切换至惰性气体（ N_2 、 He ）吹扫，腔室升温至 200℃左右进行恒温处理（该恒温温度可以根据材料再生温度灵活调整），直至样品重量不再降低，然后降温至目标温度。

4) 吸附-再生-吸附，循环测试。

6.4.1.2 结果计算方法

1) 吸附容量计算：

$$q_i = \frac{m_{ads,i} - m_{regen,i}}{m_0}$$

q_i ——第 i 次循环的单位质量吸附容量（mmol/g）；

$m_{ads,i}$ ——为第 i 次吸附后样品的质量；

$m_{regen,i}$ ——为再生结束后的质量；

m_0 ——为样品初始质量。

2) 吸附容量保留率：

各循环吸附容量与首轮吸附容量 q_1 的比值用于评估性能衰减情况：

$$Retention_i = \frac{q_i}{q_1} \times 100\%$$

3) 变异系数计算：

吸附容量的相对波动性采用变异系数（CV）进行评估：

$$CV = \frac{\sigma}{\mu} \times 100\%$$

其中， μ 为所有循环吸附容量的平均值， σ 为标准差。CV 值越低，表示循环过程中吸附性能越稳定。

变异系数：变异系数是标准差与平均值的比值，主要用于比较不同组别数据的离散程度。当进行两个或多个样本数据变异程度的比较时，如果计量单位与平均数相同时，可以直接利用标准差来比较；如果计量单位或平均数不同时，比较其变异程度就不能直接采用标准差，而采用变异系数来比较。

为确保评价结果的可靠性，至少进行 5 次吸附-再生循环；对于性能较优或待深入验证的吸附剂样品，则可延长至 10 次或以上的循环次数。

6.4.2 静态法测试循环稳定性

6.4.2.1 静态法循环稳定性测试步骤

- 1) 预处理，抽真空，200℃恒温处理 6h。
- 2) 吸附过程，循环水浴设定为目标测试温度，通过设置测试压力点开展吸附测试（测量吸附等温线，具体方法见 6.1.1.1）。
- 3) 再生过程，抽真空，腔室升温至 200℃左右进行恒温处理 3h。
- 4) 吸附-再生-吸附，循环测试

6.4.2.2 结果计算方法

1) 吸附容量计算

每一轮循环吸附完成后，通过设备记录的吸附等温线或吸附点数据，确定该温度和压力条件下的吸附容量，记为：

$$q_i = \frac{n_{\text{ads},i}}{m}$$

q_i ——第 i 次循环的单位质量吸附容量；

$n_{\text{ads},i}$ ——第 i 轮吸附过程吸附的气体摩尔数（或质量）；

m ——吸附剂质量

2) 吸附容量保持率

为评估性能衰减趋势，计算每一轮吸附容量相对于首轮吸附的保留百分比：

$$\text{Retention}_i = \frac{q_i}{q_1} \times 100\%$$

3) 变异系数计算

$$\text{CV} = \frac{\sigma}{\mu} \times 100\%$$

6.5 吸附选择性的测试方法

6.5.1 一步法测试吸附选择性

6.5.1.1 吸附选择性一步法测试步骤

- 1) 预处理 称量 0.25 g 吸附剂样品放置于 105℃鼓风干燥箱处理 24h。

- 2) 称量吸附剂质量并记为 m_{bed} 。
- 3) 将 m_{bed} 的吸附剂放置于吸附床层，通入 100 ml/min 的惰性气体 (N_2 、 He) 吹扫，腔室以 $5^\circ\text{C}/\text{min}$ 升温至 200°C 恒温处理 1-3 h，然后降温至目标温度（即测试的温度条件）。
- 4) 将气流切换为 100 ml/min 模拟烟气的混合气 (CO_2 占比 15%)，出口用质谱实时记录气体浓度变化。
- 5) 吸附过程，将气流切换至相应分压条件的混合气体，实时记录出口处气体浓度变化 C_x ($x=1$ 代表 CO_2 ， $x=2$ 代表 N_2)。

6.5.1.2 结果计算方法

吸附质的吸附量计算公式如下：

$$q = \frac{V \int_0^t (C_0 - C) dt}{22.4 \times m_{\text{bed}}}$$

其中 q (mmol g^{-1}) 是 CO_2 吸附量， V (mL min^{-1}) 是进口气体流速， C_0 (%) 是混合气中 CO_2 的质量分数， C (%) 是出口 CO_2 的浓度， t (min) 是吸附时间， m_{bed} (g) 是吸附床层的吸附质质量。

吸附选择性计算方法如下：

理想溶液吸附理论 (IAST)：理想溶液吸附理论已被广泛应用于评估典型烟气中 15% CO_2 和 85% N_2 的选择性。（Myers and Prausnitz 1965 年提出）

$$S_{\text{IAST}} = \frac{q_1/q_2}{p_1/p_2}$$

q_1 、 q_2 是 CO_2 和 N_2 的吸附容量， p_1 、 p_2 是 CO_2 和 N_2 的分压。

6.5.2 两步法测试吸附选择性

6.5.2.1 吸附选择性一步法测试步骤

- 1) 在预先干燥并已称重的样品管中称取吸附剂材料 0.15g，放置于天平中称重。
- 2) 将样品管安装于测试仪器上，设置升温程序，开展抽真空脱气处理（以 $5^\circ\text{C}/\text{min}$ 升温至 200°C 并且保温 6h）
- 3) 将样品管拆下，放置于天平进行称重，与空样品管作差获得脱气后样品质量 m 。
- 4) 将样品管安装至测试仪器，设置吸附质类型、样品质量、测试压力范围（0-1bar）、恒温浴温度、开展吸附等温线测试。
- 5) 重复上述过程 1-4，分别测量吸附质为 CO_2 和 N_2 条件下的吸附等温线。
- 6) 将上述吸附等温线代入经验公式进行拟合，可以获得吸附量 q_x 关于压力 p_x 的关系式。 $x=1$ 代表 CO_2 ， $x=2$ 代表 N_2 ）。常用的吸附等温线拟合公式如表 1 所示。

表 1 吸附等温线拟合公式

模型名称	公式	符号含义
Langmuir model	$Q_e = \frac{Q_{max} K_L p}{1 + K_L p}$	K_L 模型常数
Freundlich model	$Q_e = K_F p^n$	K_F 模型常数
Redlich-Peterson model	$Q_e = \frac{K_R p}{1 + a_R p^{b_R}}$	K_R 模型常数, a_R 、 b^R 经验常数
Temkin isotherm	$q_e = B \ln A + B \ln C_e$	$B=RT/b$, b 为模型常数, A 为平衡结合常数
Toth isotherm model	$Q_e = \frac{Q_m b p}{(1 + (b p)^n)^{1/n}}$	b 为平衡常数

6.5.2.2 结果计算方法

1) 理想溶液吸附理论 (IAST)

理想溶液吸附理论已被广泛应用于评估典型烟气中 15% CO₂ 和 85% N₂ 的选择性。
(Myers and Prausnitz1965 年提出)

$$S_{IAST} = \frac{q_1/q_2}{p_1/p_2}$$

q_1 、 q_2 是 CO₂ 和 N₂ 的吸附容量, p_1 、 p_2 是 CO₂ 和 N₂ 的分压。
通过 6.5.2.1 获得的 CO₂ 和 N₂ 的吸附等温线, 从 CO₂ 吸附等温线中选取 $p_1=0.15$ bar 条件下的吸附容量 q_1 , 从 N₂ 吸附等温线中选取 $p_2=0.85$ bar 条件下的吸附容量 q_2 , 将 q_1 、 q_2 、 p_1 、 p_2 代入上述方程即可获得吸附剂在常压条件下 15% CO₂ 含量的烟气中的 CO₂ 选择分离常数。

2) 亨利定律

为了通过亨利定律计算吸附材料的 CO₂ 和 N₂ 的吸附选择性, 首先需要获得不同气体的吸附等温线。

将对应的吸附量 q_x 和压力 p_x ($x=1$ 代表 CO₂, $x=2$ 代表 N₂) 代入式 (1) 所示维里型热方程进行拟合获得维里常数 a_0 、 b_0 。

然后通过式 (2) 计算不同气体的亨利常数。

将不同气体的亨利常数代入式 (3) 即可以获得材料的吸附选择性。

$$\ln p = \ln q + \frac{1}{T} \sum_{i=0}^m a_i q^i + \sum_{j=0}^n b_j q^j \tag{1}$$

$$K_H = \exp(-b_0) \exp\left(-\frac{a_0}{T}\right) \tag{2}$$

$$S_{CO_2/N_2} = K_{H,CO_2}/K_{H,N_2} \tag{3}$$

7 测试报告

依据本标准出具的测试报告, 应包含测试项目、测试方法、测试结果、测试条件、所用仪器设备信息、检测人员等内容。示例表格如表 2 所示。

表 2 测试报告样表

测试项目	测试方法	测试结果	性能评级	备注
