КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИДРОДИНАМИКИ И МАССОПЕРЕНОСА ПРОЦЕССА СВЕРХКРИТИЧЕСКОЙ СУШКИ АЭРОГЕЛЕЙ В АППАРАТАХ ЛАБОРАТОРНОГО И ПРОМЫШЛЕННОГО МАСШТАБА

Э.В. Голубев, Е.Н. Суслова, А.Е. Лебедев

Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, ул. Героев Панфиловцев, 20, Москва, Российская Федерация, 125480

E-mail: eldgol01@gmail.com, suslova.ekaterina.nik@mail.ru, artem.evg.lebedev@gmail.com

В данной статье представлены результаты моделирования гидродинамики и массопереноса процесса сверхкритической сушки в аппаратах различного объема. Расчёты гидродинамики и массопереноса проводились с помощью программного пакета Ansys Fluent на примере аппаратов лабораторного и промышленного объемов – 2 и 70 л, соответственно. Моделирование проводилось с целью прогнозирования времени проведения сверхкритической сушки и возможности масштабирования процесса. Для моделирования гидродинамики и массопереноса использовались положения механики сплошных сред. Многокомпонентная система рассматривалась как вязкая сжимаемая жидкость. Расчет проводился в двух областях: пористом теле и в свободном объеме аппарата определенного масштаба. Дополнительно проведено исследование гидродинамики и массопереноса процесса в присутствии рассекателя, необходимого для минимизации образования застойных зон в аппарате. С целью оптимизации расчет рассекателя проводился отдельно от аппарата. Полученные данные использовались в дальнейших расчетах гидродинамики и массопереноса процесса с помощью пользовательской функции (UDF), написанной на языке программирования С. Предварительно проводилось исследование кинетики сверхкритической сушки в аппарате объемом 2 л, которое необходимо для оценки возможности применения предложенной математической модели для аппаратов промышленного уровня. В ходе моделирования было показано, что использование предложенной модели возможно для описания процесса сверхкритической сушки в аппаратах различного объема. Кроме того, были получены расчетные кривые кинетики сверхкритической сушки, профили распределения скоростей сверхкритического диоксида углерода и распределение концентрации изопропилового спирта в различные моменты времени по сечению аппаpama.

Ключевые слова: моделирование гидродинамики, аэрогель, сверхкритическая сушка

COMPUTER SIMULATION OF HYDRODYNAMICS AND MASS TRANSFER OF SUPERCRITICAL DRYING OF AEROGELS IN LABORATORY AND INDUSTRIAL SCALE APPARATUSES

E.V. Golubev, E.N. Suslova, A.E. Lebedev

Department of Chemical and Pharmaceutical Engineering of Mendeleev University of Chemical Technology of Russia. Geroyev Panfilovtsev str., 20, Moscow, Russian Federation, 125480 E-mail: eldgol01@gmail.com, suslova.ekaterina.nik@mail.ru, artem.evg.lebedev@gmail.com

This article presents the results of modeling the hydrodynamics and mass transfer of the supercritical drying process in apparatuses of various volumes. Calculations of hydrodynamics and mass transfer were carried out using the Ansys Fluent software package on the example of laboratory and industrial volume apparatuses -2 and 70 l, respectively. The simulation was carried out in order to predict the time of supercritical drying and the possibility of scaling the process. The

positions of continuum mechanics were used to model hydrodynamics and mass transfer. The multicomponent system was considered as a viscous compressible liquid. The calculation was carried out in two areas: a porous body and a free volume of a apparatus of a certain scale. Additionally, a study of the hydrodynamics and mass transfer of the process in the presence of a divider necessary to minimize the formation of stagnant zones in the apparatus was carried out. In order to optimize the calculation of the divider was carried out separately from the apparatus. The data obtained were used in further calculations of the hydrodynamics and mass transfer of the process using a user-defined function (UDF) written in the C programming language. A preliminary study of the kinetics of supercritical drying in a 2-liter apparatus was carried out, which is necessary to assess the possibility of using the proposed mathematical model for industrial-level apparatuses. During the simulation, it was shown that the use of the proposed model is possible to describe the process of supercritical drying in apparatuses of various volumes. In addition, calculated curves of the kinetics of supercritical drying, profiles of the velocity distribution of supercritical carbon dioxide and the distribution of the concentration of isopropyl alcohol at various time points along the cross section of the apparatus were obtained.

Key words: modeling of hydrodynamic, aerogel, supercritical drying

Для цитирования:

Голубев Э.В., Суслова Е.Н., Лебедев А.Е. Компьютерное моделирование гидродинамики и массопереноса процесса сверхкритической сушки аэрогелей в аппаратах лабораторного и промышленного масштаба. *Рос. хим. ж. (Ж. Рос. хим. об-ва).* 2023. Т. LXVII. № 2. С. 37–44. DOI: 10.6060/RCJ.2023672.4.

For citation:

Golubev E.V., Suslova E.N., Lebedev A.E. Computer simulation of hydrodynamics and mass transfer of supercritical drying of aerogels in laboratory and industrial scale apparatuses. *Ros. Khim. Zh.* 2023. V. 67. N 2. P. 37–44. DOI: 10.6060/RCJ.2023672.4.

ВВЕДЕНИЕ

Аэрогель – это инновационный материал, который обладает уникальными свойствами, основными из которых являются низкая плотность (3-100 кг/м³), высокая удельная площадь поверхности (400-800 м²/г), низкое значение коэффициента теплопроводности (14-16 мВт/(м²·К)) и высокая пористость (90-98%) [1]. Благодаря своим свойствам аэрогели находят своё применение при производстве медицинских изделий [2], теплоизоляции [3] и электроники [4]. Кроме того, они могут применяться в качестве биодатчиков [5] и носителей активных веществ [6].

Процесс получения аэрогелей можно разделить на три основных этапа: получение геля, замена растворителя и сверхкритическая сушка [7].

На первом этапе формируется основной каркас будущего аэрогеля. Основой неорганических аэрогелей, как правило, является диоксида кремния. Тогда прекурсорами могут быть различные силаны (например, тетраэтоксисилан или метилтриметоксилан) [8, 9, 10]. Органические аэрогели получают на основе различных биополимеров (хитозан, альгинат) [11, 12].

Для удаления воды и непрореагировавших групп из пор геля на втором этапе проводится замена растворителя. Растворитель, находящийся в порах геля играет важную роль в процессе сверхкритической сушки. Он должен быть хорошо растворим в сверхкритическом флюиде (диоксиде углерода) и при этом иметь сравнительно небольшое значение поверхностного натяжения с целью предотвращения схлопывания пор. Чаще всего используются органические полярные растворители (спирты, ацетон).

Сверхкритическая сушка является завершающим и самым важным этапом процесса получения аэрогелей. В ходе неё из пор геля происходит удаления растворителя. Удаление происходит методом замещения его на сверхкритический флюид, в качестве которого обычно выступает диоксид углерода [13]. Удаление растворителя с помощью сверхкритической сушки происходит без разрушения пористой структуры геля, за счёт отсутствия воздействия капиллярных сил.

Условно, процесс сверхкритической сушки можно разделить на две основных стадии: конвективный массоперенос из свободного объема аппарата и диффузионное замещение вещества внутри свободного объема геля. В связи с этим, необходимо учитывать изменения параметров системы в ходе процесса, таких как коэффициент диффузии и плотность. Кроме того, необходимо определить оптимальные параметры проведения процесса. Так, на первом этапе, в ходе процесса конвективного массопереноса, необходимо поддержание наибольшего расхода углекислого газа, в то время как на втором этапе в ходе диффузионного замещения вещества, необходим подбор минимального расхода, которого будет достаточно для поддержания минимальной концентрации растворителя вокруг геля.

Моделирование химико-технологических процессов позволяет значительно сократить материальные ресурсы, затрачиваемые на экспериментальные исследования. Кроме того, моделирование процессов позволяет определять оптимальное время его проведения, что в свою очередь влияет на качество получаемого продукта.

Для предсказания наилучших параметров проведения сверхкритической сушки возможно применение метода компьютерного моделирования его гидродинамики и массопереноса. Результатом является расчетная кривая кинетики процесса, по которой возможно определить оптимальное время проведения сверхкритической сушки.

К уравнениям состояния, с помощью которых возможен расчет физико-химических свойств бинарной системы в сверхкритическом состоянии, относятся: уравнение Ван-дер-Ваальса [14], модифицированное уравнение Редлиха-Квонга [15], уравнение Соаве-Редлиха-Квонга [16], уравнение Пенга-Робинсона [17], уравнение Пателя-Тея [18], уравнение состояния для околокритической и критической области [19] и модифицированное уравнение Ли-Кеслера [20].

Таким образом, моделирование химикотехнологических процессов, в частности, сверхкритической сушки, является актуальной задачей, решение которой могло бы значительно ускорить развитие химической промышленности и переход от лабораторных установок к промышленным.

МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

В рамках исследования проводится экспериментальное исследование гидродинамики и массопереноса процесса сверхкритической сушки. Исследование предполагает получение экспериментальной кривой кинетики процесса с целью их сравнения с результатами моделирования. Эксперимент проводится в аппарате объемом 2 л для оценки применимости предложенной модели для описания процесса сверхкритической сушки.

В рамках эксперимента проводится отбор проб растворителя, который выходит из аппарата в ходе процесса, в определенные промежутки времени. По получаемым данным делается вывод о характере этапа сброса растворителя и скорости процесса сверхкритической сушки. Подробно методика эксперимента описана в статье [21].

ОПИСАНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

Для моделирования гидродинамики и массопереноса процесса сверхкритической сушки материалов используются положения механики сплошных сред, применяемые для описания движения газообразных, жидких и деформируемых твердых тел. В рамках подбора уравнений модели многокомпонентная система рассматривается как вязкая сжимаемая жидкость. Расчет проводится в двух областях: пористом теле и в свободном объеме аппарата определенного масштаба.

Математическая модель включает в себя системы дифференциальных уравнений: для свободного объема аппарата (уравнение 1), объема пористого тела (уравнение 2), начальные и граничные условия (уравнения 3-12). Системы дифференциальных уравнений включают в себя уравнения неразрывности по компонентам системы, уравнения сохранения количества движения и уравнения сохранения энергии.

Система уравнений для свободного объема аппарата (Θ):

$$\begin{cases} \frac{\partial(\rho Y_1)}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{v} Y_1) = \nabla(\rho D \nabla Y_1) \\ \frac{\partial(\rho Y_2)}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{v} Y_2) = \nabla(\rho D \nabla Y_2) \\ \frac{\partial(\rho \vec{v})}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla P + \nabla(\tau^{kl}) + \rho \vec{g} \\ \frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \nabla(\vec{v}(\rho E + P)) = \nabla(\lambda \nabla T) \end{cases}$$
(1)

Система уравнений для свободного объема пористого тела (Ω):

$$\begin{cases} \frac{\partial(\rho Y_1)}{\partial t} = \nabla(\rho D \nabla Y_1) \\ \frac{\partial(\rho Y_2)}{\partial t} = \nabla(\rho D \nabla Y_2) \\ \frac{\partial(\rho E)}{\partial t} = \nabla(\lambda \nabla T) \end{cases}$$
(2)

Начальные и граничные условия:

$$T(x, y, t)_{t=0} = T_{Hay}$$
(3)

$$\forall x, y \in \Theta Y_1(x, y, t)_{t=0} = 0$$
(4)

$$\forall x, y \in \Omega Y_2(x, y, t)_{t=0} = 0$$
(5)

$$\vec{v}(x_{BX}, y_{BX}, t) = v_{BX}$$
(6)

$$\vec{v}(x_{\rm CT}, y_{\rm CT}, t) = 0$$
(7)

$$\vec{v}(x_{\rm CT}, y_{\rm CT}, t)_{\forall x_{\rm CT}, y_{\rm CT}} = 0$$
(8)

$$T(x_{\rm CT}, y_{\rm CT}, t) = T_{\rm CT}$$
(9)

$$\nabla T(x_{r}, y_{r}, t)_{\forall x_{r}, y_{r} \in \Theta} = \nabla T(x_{r}, y_{r}, t)_{\forall x_{r}, y_{r} \in \Omega}$$
(10)
$$\nabla Y_{1}(x_{cr}, y_{cr}, t) = 0 \ \nabla Y_{2}(x_{cr}, y_{cr}, t) = 0 \ (11)$$

 $\nabla Y_1(x_{\Gamma}, y_{\Gamma}, t)_{\forall x_{\Gamma}, y_{\Gamma} \in \Theta} = \nabla Y_1(x_{\Gamma}, y_{\Gamma}, t)_{\forall x_{\Gamma}, y_{\Gamma} \in \Omega}$

$$\nabla Y_2(x_{\Gamma}, y_{\Gamma}, t)_{\forall x_{\Gamma}, y_{\Gamma} \in \Theta} = \nabla Y_2(x_{\Gamma}, y_{\Gamma}, t)_{\forall x_{\Gamma}, y_{\Gamma} \in \Omega}$$
(12)

где р – плотность смеси, кг/м³; \vec{v} – вектор скорости движения смеси, м/с; Т – температура, К; Р – давление, Па; Y₁ – массовая доля изопропилового спирта, кг/кг; \vec{g} – ускорение свободного падения, м/с²; D – коэффициент диффузии, м²/с; λ – коэффициент теплопроводности смеси, Вт/м·К; Е – полная энергия, Дж/кг, τ^{kl} – тензор вязких напряжений кг/м·с²; η – динамическая вязкость смеси, Па·с; М_w – молярная масса, кг/кмоль; Н⁰ – энтальпия образования вещества, кДж/кмоль; индексы: ст – значения на стенках исследуемой области; г – значения на границе между расчетными областями.

Бинарная система представляет собой смесь «изопропиловый спирт – диоксид углерода», физико-химические и фазовые характеристики которой определяются с помощью уравнения состояния Пенга-Робинсона (уравнение 13) и правил смешения Ван-дер-Ваальса (уравнение 14):

$$\begin{cases}
P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V(V+b)+b(V-b)} \\
a = 0.4572 \frac{(RT_{\rm Kp})^2}{P_{\rm Kp}} \left[1 + m(1 - \sqrt{T_{\rm Hp}})\right]^2 \\
b = 0.0778 \frac{RT_{\rm Kp}}{P_{\rm Kp}}
\end{cases}$$
(13)

 $m = 0.3746 + 1.54226\omega - 0.2699\omega^2$

Решение системы уравнений математической модели включает использование метода конечных объемов, который реализован в программном пакете Ansys Fluent.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЯ

Моделирование гидродинамики и массопереноса в аппарате объемом 2 л

Модель реактора, изображенная на рис. 1 имеет объемом 2 л. Внутри модели аппарата расположены образцы гелей. Образцы представляют собой неорганические пористые тела в виде монолитных пластин на основе диоксида кремния. Линейные размеры составляют $8.5 \times 8.6 \times 0.6$ см и $8.6 \times 8.6 \times 0.85$ см для первого и второго образцов, соответственно. Плотность первого образца $\rho = 1.12$ г/см³, второго $\rho = 1.08$ г/см³. Пористость гелей принимается 95%.

После построения геометрии проводится создание расчетной сетки. Количество ячеек составило 378996. С целью повышения расчетной точности локально проводится адаптация расчетной сетки.

В начальный момент времени внутри аппарата находится смесь диоксида углерода и изопропилового спирта. Источником изопропилового спирта в аппарате является монолит геля, растворитель выделяется из него в ходе набора давления и равномерно распределяется по всему объему аппарата. В табл. 1 приведены начальные условия для расчета процесса сверхкритической сушки.



Рис. 1. Виртуальная геометрия аппарата объемом 2 л

Таблица 1 Начальные успория провеления расната

| пачальные условия проведения расчета | | |
|--|----------------------|--------------------|
| Параметр | Единицы измерения | Значение |
| Температура стенки и входного потока | К | 313.15 |
| Давление в системе | Па | 12×10 ⁶ |
| Расход диоксида уг- лерода на вход в ап- парат | кг/ч | 4.7 |
| Общий объем моно- литов геля | M ³ | 105.26×10-6 |

Процесс массопереноса, в частности, профили изменения массовой доли изопропилового спирта по сечению аппарата в различные моменты времени, представленные на рис. 2, приведены только для первых 150 мин, так как именно в это время происходит наиболее значимое изменение концентрации изопропилового спирта внутри объема аппарата и пористого тела.

Основной задачей проведения расчетов массопереноса процесса сверхкритической сушки является получение расчетной кривой кинетики процесса (рис. 3). Кривая отображает изменение массы изопропилового спирта внутри аппарата в зависимости от времени. Для этого на каждой итерации по времени проводится расчет интеграла массовой доли по объему всей расчетной области. Кроме того, для сравнения на графике приведена экспериментальная кривая кинетики процесса сверхкритической сушки. Относительная ошибка расчетных данных по сравнению с экспериментальными составила 13.52%.



Рис. 2. Изменения профиля распределения массовой доли изопропилового спирта по сечению аппарата объемом 2 л (цветом обозначено значение массовой доли изопропилового спирта)



Рис. 3. Расчетная (сплошная линия) и экспериментальная (точечная) кривые кинетики процесса сверхкритической сушки в аппарате объемом 2 л

Условием завершения процесса сверхкритической сушки является достижение концентрации изопропилового спирта в высушенном образце, составляющей не более 5%. Плотность аэрогеля принимается 100 кг/м³. То есть концентрации 5% изопропилового спирта в образце соответствует 0.55 г.

Исходя из этого, делается вывод, что для успешного проведения процесса сверхкритической сушки при данных условиях его продолжительность должна быть не менее 8 ч.

Моделирование гидродинамики и массопереноса в аппарате объемом 70 л

Моделирование гидродинамики аппарата промышленного масштаба проводится на примере реактора объемом 70 л. Такой аппарат входит в состав опытно-промышленной установки для получения аэрогелей, которая расположена в г. Щелково на территории ООО «Ниагара».

Реактор представляет собой аппарат высокого давления цилиндрической формы высотой 1000 мм и диаметром 332 мм. Аппарат имеет плоскую крышку и плоское днище, с расположенным на нем выходным патрубком с внутренним диаметром 17.5 мм. Присоединение крышки к аппарату происходит с помощью фланцевого соединения. В верхней части аппарата объемом 70 л располагается рассекатель, который представляет собой перфорированный лист нержавеющей стали с отверстиями, расположенными по радиусам. Расход углекислого газа на входе постоянный и составляет 150 кг/ч. Компьютерное моделирование аппарата вместе с рассекателем значительно увеличивает вычислительную сложность задачи. По этой причине, расчет гидродинамики через рассекатель производится отдельно. В дальнейшем полученные результаты будут использованы при расчете аппарата объемом 70 л.

Полученный профиль используется для определения поля распределения скоростей по радиусу рассекателя. Для этого в модели аппарата строится линия вдоль радиуса от оси симметрии аппарата (рис. 4).



Рис. 4. Построение линии (указана красными стрелками) для вывода профиля скоростей движения среды

На построенной линии определяется профиль скоростей, который представлен на рис. 5. Полученный профиль распределения скоростей вдоль радиуса рассекателя используется в качестве граничного условия на вход в аппарат. Для этого необходимо использование пользовательской функции (UDF), которая пишется на языке программирования С.



Рис. 5. Профиль скоростей в аппарате вдоль построенной линии

В аппарате объемом 70 л высушиваемый материал представляет собой скрученный рулон (рис. 6). Задача является осесимметричной, следовательно, расчет ведется по сектору в 30°, что составляет 1/12 часть всей геометрии. Количество ячеек расчетной сетки составляет 312963. С целью повышения расчетной точности проводится локальная адаптация расчетной сетки. В качестве начального условия на вход задается полином, полученный при расчете гидродинамики через рассекатель.



Рис. 6. Виртуальная геометрия аппарата объемом 70 л с гелем, скрученным в рулон (слева), 1/12 часть виртуальной геометрии (в середине), расчетная сетка (справа). Серым цветом обозначен объем аппарата, голубым – объем геля

Полученные в результате расчета массопереноса профили изменения концентрации изопропилового спирта по сечению аппарата в различные моменты времени (рис. 7), приведены только для первых 180 мин. Именно за это время происходит наиболее значительное изменение концентрации изопропилового спирта в объеме аппарата и пористого тела. Это связано с преобладанием диффузионного характера переноса вещества.



Рис. 7. Изменения профиля распределения массовой доли изопропилового спирта по сечению аппарата объемом 70 л в течение первых 180 мин процесса (цветом обозначено значение массовой доли изопропилового спирта)

По полученным профилям видно, что скорость изменения концентрации изопропилового спирта зависит от геометрии высушиваемого образца. Внутренний диаметр рулона в несколько раз больше расстояния между его слоями, в связи с чем, диоксид углерода в первую очередь проникает именно во внутреннюю часть образца. Использование рассекателя или заданного полинома профиля скоростей на входе снижает этот эффект, но не убирает полностью. Во вторую очередь, диоксид углерода проникает в область между образцом и стенками аппарата. Ширина между поверхностью образца и стенкой аппарата больше, чем расстояние между слоями, но намного меньше внутреннего диаметра. В то время, когда диоксид углерода начинает проникать между слоями образца, процесс преимущественно обладает диффузионным характером переноса вещества в порах образца. Диффузия в порах является лимитирующей стадией процесса сверхкритической сушки.

Основной задачей расчета гидродинамики и массопереноса в аппарате объемом 70 л является получение расчетной кривой кинетики процесса (рис. 8). Кривая отображает изменение массы изопропилового спирта в аппарате в зависимости от времени.



Рис. 8. Расчетная кривая кинетики процесса сверхкритической сушки в аппарате объемом 70 л

По кривой видно, что наибольшая скорость процесса приходится на первые 3-5 мин, когда диоксид углерода проникает во внутренний диаметр образца. Второй период снижения скорости лежит в пределах 30-40 мин, когда диоксид углерода проникает между поверхностью образца и стенкой. После 40 минут на графике заметна гладкая экспоненциальная кривая, которая указывает на протекание диффузионного массопереноса в ходе сверхкритической сушки.

Условием завершения процесса сверхкритической сушки является достижение максимально разрешенной концентрации изопропилового спирта в высушенном образце, которая составляет не более 5%. Плотность аэрогеля принимается 100 кг/м³. То есть концентрации 5% изопропилового спирта в образце соответствует 1.28 кг. Исходя из этого, делается вывод, что для успешного проведения процесса сверхкритической сушки при данных условиях его продолжительность должна быть не менее 9 ч.

выводы

Полученные в ходе исследования результаты, среди которых поля распределения векторов скоростей, распределения концентраций компонентов по сечению аппарата в ходе процесса сверхкритической сушки, расчетные кривые кинетики процесса сушки, подтверждают, что предложенная модель может быть использована для описания процесса сверхкритической сушки с целью определения его гидродинамики и массопереноса, прогнозирования времени ее проведения. Результаты проведения вычислительного эксперимента для аппарата промышленного масштаба наглядно демонстрируют влияние геометрических особенностей и расположения высушиваемого материала на кинетику процесса сверхкритической сушки. Предложенный в работе подходи может быть успешно использован при разработке нового оборудования для реализации процесса сверхкритической сушки, при масштабировании этого процесса для получения материалов на основе аэрогелей произвольной формы, для оптимизации процесса. Применение данного подхода позволит значительно сократить время разработки новых технологий получения материалов на основе высокопористых материалов, снизить себестоимость получаемой таким образом продукции за счет оптимизации параметров процесса. С применением предлагаемого подхода может быть изучено влияние внешних параметров (температуры, давления и расхода сушильного агента), геометрии аппарата, расположения и формы высушиваемого материала на ход процесса сверхкритической сушки.

БЛАГОДАРНОСТЬ И ФИНАНИСРОВАНИЕ

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда №22-79-00154.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов, требующего раскрытия в данной статье.

The authors declare the absence a conflict of interest warranting disclosure in this article.

ЛИТЕРАТУРА REFERENCES

- 1. Aegerter M.A., Leventis N., Koebel M.A. Aerogels handbook: Advances in sol-gel derived materials and technologies. New York: Springer. 2011. 932 p.
- Bento C. S. A., Alarico S., Empadinhas N., de Sousa H. C., & Braga M. E. M. The Journal of Supercritical Fluids. 2022. V. 184. P. 105570. DOI: 10.1016/j.supflu.2022.105570.
- An L., Wang J., Petit D., Armstrong J. N., Li C., Hu Y., Huang Y., Shao Z., & Ren S. Applied Materials Today. 2020. V. 21. P. 100843. DOI: 10.1016/j.apmt.2020.100843.
- Wei N., Wu J., Tang Y., Lu S., & Wang L. Journal of Power Sources. 2020. V. 479. P. 229096. DOI: 10.1016/j.jpowsour.2020.229096.
- Mahmoudpour M., Dolatabadi J. E.-N., Hasanzadeh M., & Soleymani J. Advances in Colloid and Interface Science. 2021. V. 298. P. 102550. DOI: 10.1016/j.cis.2021.102550.
- Fonseca L. M., Silva F. T. da Bruni G. P., Borges C. D., Zavareze E. da R., & Dias A. R. G. International Journal of Biological Macromolecules. 2021. V. 169. P. 362-370. DOI: 10.1016/j.ijbiomac.2020.12.110.
- Lebedev A.E., Katalevich A.M., Menshutina N.V. The Journal of Supercritical Fluids. 2015. V. 106. P. 122-132. DOI: 10.1016/j.supflu.2015.06.010.
- Nadargi D.Y., Kalesh R.R., Rao A.V. Journal of Alloys and Compounds. 2009. V. 480. N 2. P. 689-695. DOI: 10.1016/j.jallcom.2009.02.027.

- Bartosz Nowak, Marta Bonora, Maria Zuzga, Łukasz Werner, Anna Jackiewicz-Zagorska, Jakub M. Gac. Journal of Environmental Chemical Engineering. 2022. V. 10. N 5. P. 108410. DOI: 10.1016/j.jece.2022.108410.
- Chao Yao, Xin Dong, Guangpeng Gao, Fei Sha, Dongyu Xu. Journal of Non-Crystalline Solids. 2021. V. 562. P. 120778. DOI: 10.1016/j.jnoncrysol.2021.120778.
- Songlin Fan, Jian Chen, Chao Fan, Guangliang Chen, Shigen Liu, Hemao Zhou, Rangtao Liu, Yanjuan Zhang, Huayu Hu, Zuqiang Huang, Yuben Qin, Jing Liang. Journal of Hazardous Materials. 2021. V. 416. P. 126225. DOI: 10.1016/j.jhazmat.2021.126225.
- Ce Gao, Xue-Lian Wang, Qing-Da An, Zuo-Yi Xiao, Shang-Ru Zhai. Carbohydrate Polymers. 2021. V. 256. P. 117564. DOI: 10.1016/j.carbpol.2020.117564.
- Shi X., Xiao C., Ni H., Gao Q., Han L., Xiao D., & Jiang S. Energy Reports. 2023. V. 9. P. 2286-2299. DOI: 10.1016/j.egyr.2023.01.023.
- Sato T., Sugiyama M., Misawa M., Hamada K., Itoh K., Mori K., & Fukunaga T. Journal of Molecular Liquids. 2009. V. 147. N 1-2. P. 102-106. DOI: 10.1016/j.molliq.2008.06.017.

- Heidaryan E., Jarrahian A. The Journal of Supercritical Fluids. 2013. V. 81. P. 92-98. DOI: 10.1016/j.supflu.2013.05.009.
- Frey K., Modell M., Tester J. Fluid Phase Equilibria. 2009.
 V. 279. N 1. P. 56-63. DOI: 10.1016/j.fluid.2009.02.005.
- Abudour A. M., Mohammad S. A., Robinson R. L., & Gasem K. A. M. Fluid Phase Equilibria. 2012. V. 335. P. 74-87. DOI: 10.1016/j.fluid.2012.08.013.
- Yang X., Rowland D., Sampson C. C., Falloon P. E., & May E. F. Fuel. 2022. V. 314. P. 123033. DOI: 10.1016/j.fuel.2021.123033.
- Du G., Hu J. International Journal of Greenhouse Gas Control. 2016. V. 49. P. 94-107. DOI: 10.1016/j.ijggc.2016.02.025.
- Mller N., Weare J. Geochimica et Cosmochimica Acta. 1992.
 V. 56. N 7. P. 2605-2617.
- Lebedev A.E., Lovskaya D.D., Menshutina N.V. The Journal of Supercritical Fluids. 2021. V. 174. P. 105238. DOI: 10.1016/j.supflu.2021.105238.

Поступила в редакцию 19.01.2023 Принята к опубликованию 17.03.2023

Received 19.01.2023 Accepted 17.03.2023