

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЙ СХЕМЫ ПРОЦЕССА ПОЛУЧЕНИЯ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ АЭРОГЕЛЕЙ

А.В. Шиндряев, А.Е. Лебедев, Н.В. Меньшутина

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

E-mail: andrew95x@gmail.com, artem.evg.lebedev@gmail.com, chemcom@muctr.ru

В работе рассмотрен метод прямого синтеза функциональных соединений в объеме неорганических аэрогелей, совмещенный со сверхкритической сушкой композиционных материалов. Рассмотрены три основные стадии процессов получения материалов. Первая стадия включала в себя синтез функциональных соединений на поверхности гелей. Вторая стадия – вытеснение растворителя из свободного объема аппарата путем потока через автоклав сверхкритического диоксида углерода. Третья стадия – сверхкритическая сушка, в результате которой происходит удаление растворителя из пор материала. Приведены параметры ведения процессов синтеза и сверхкритической сушки. Представлена и описана технологическая схема промышленной установки объемом 70 л для ведения сверхкритических процессов, расположенная в ООО «Ниагара», г. Щелково. Для представленных процессов разработана математическая модель с использованием программного пакета CHEMCAD, который позволяет определить материальный и тепловой балансы как отдельных аппаратов, так и технологической схемы в целом. Проведен расчет влияния количества изопропанола на расход диоксида углерода. По полученным данным проведен анализ энергетических затрат на проведение процесса синтеза функциональных соединений в объеме аэрогелей. На основе математической модели определен энерго- и ресурсоэффективный способ технологического оформления процессов синтеза и сверхкритической сушки. Установлено уменьшение энергетических затрат технологической схемы с использованием тепла после компримирования.

Ключевые слова: аэрогель, композиционные материалы, сверхкритический диоксид углерода, сверхкритическая сушка, технологическая схема

SIMULATION OF THE TECHNOLOGICAL SCHEME FOR THE PROCESS OF OBTAINING COMPOSITE MATERIALS BASED ON AEROGELS

A.V. Shindryaev, N.V. Menshutina, A.E. Lebedev

Department of Chemical and Pharmaceutical Engineering, Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Geroev Panfilovtsev st., 20, Moscow, Russian Federation, 125480

E-mail: andrew95x@gmail.com, artem.evg.lebedev@gmail.com, chemcom@muctr.ru

This paper discusses a method of direct synthesis of functional compounds in the volume of inorganic aerogels, combined with supercritical drying of composite materials. Three main stages of material production are considered. The first stage includes synthesis of functional compounds on the gel surfaces. The second stage involves displacement of solvents from the free volume of the apparatus by flowing through an autoclave of supercritical carbon dioxide. The third stage is supercritical drying which removes the solvent from the material pores. Synthesis and supercritical drying process parameters are presented. A technological scheme of an industrial installation with a volume of 70 l for conducting supercritical processes located in Niagara LLC, Shchelkovo, is described. A mathematical model using the CHEMCAD software package was developed for the presented processes which allows determining the material and thermal balances

of both individual units and the whole technological scheme. An analysis of the energy costs of the synthesis of functional compounds in aerogel volumes was carried out on the basis of calculation of the effect of the amount of isopropanol on the flow rate of carbon dioxide. An energy and resource-efficient method of technological implementation of the synthesis and supercritical drying process was determined based on the mathematical model. A reduction in energy costs was achieved by using heat after compression.

Key words: aerogel, composite materials, supercritical carbon dioxide, supercritical drying, technological scheme

Для цитирования:

Шиндряев А.В., Лебедев А.Е., Меньшутина Н.В. Моделирование технологической схемы процесса получения композиционных материалов на основе аэрогелей. *Рос. хим. ж. (Ж. Рос. хим. об-ва)*. 2023. Т. LXVII. № 2. С. 28–36. DOI: 10.6060/R CJ.2022672.3.

For citation:

Shindryaev A.V., Menshutina N.V., Lebedev A.E. Simulation of the technological scheme for the process of obtaining composite materials based on aerogels. *Ros. Khim. Zh.* 2023. V. 67. N 2. P. 28–36. DOI: 10.6060/R CJ.2022672.3.

ВВЕДЕНИЕ

В последнее время аэрогели привлекают все большее внимание в различных отраслях промышленности и науки. Уникальная структура позволяет получать материалы с чрезвычайно высокой пористостью, низкой плотностью, высокой удельной поверхностью, высокой диэлектрической прочностью и низкой теплопроводностью [1,2]. Такие свойства позволяют применять аэрогели в аэрокосмической отрасли [3], в области производства и хранения энергии [4], биомедицинских устройствах и имплантах [5], датчиках и покрытиях [6]. С момента открытия этого уникального материала было проведено множество экспериментальных исследований по получению аэрогелей на основе диоксида кремния [7], оксидов металлов [8], халькогенидов [9], биополимеров [10], смол [11].

Для придания новых функциональных свойств поверхность аэрогеля может быть модифицирована с получением гибридных композиционных материалов. Такие материалы могут обладать превосходными термическими, механическими и электрическими свойствами [12], в зависимости от параметров их получения. Композиционные материалы на основе аэрогелей применяются в различных областях. Композиты на основе аэрогеля диоксида кремния используются в качестве высокоэффективных теплоизоляторов [13], материалы из гидрофобных полимеров и поверхностно-активных веществ – в качестве пористых сорбентов для разливов нефти [14]. Внедрение электропроводящих наноматериалов в пористую структуру аэрогеля, таких как углеродные нанотрубки и нановолокна, приводит к возможности разработки мате-

риалов для хранения энергии, таких как суперконденсаторы и литий-ионные батареи [15]. Благодаря использованию биосовместимых материалов, композиционные материалы на основе аэрогелей используются во многих отраслях медицины: доставка лекарств, тканевые каркасы и заживление ран [16].

Важным этапом в процессе получения аэрогелей и композиционных материалов на их основе является сверхкритическая сушка гелей. По мере протекания данного процесса происходит удаление растворителя из пор геля [17, 18]. Сверхкритическая сушка, как и любой вид сушки, является энергозатратным процессом, требующим решения задач оптимизации ресурсо- и энергопотребления. В настоящее время эти задачи решаются с использованием компьютерных пакетов моделирующих программ, которые позволяют значительно упростить разработку технологических схем. Это особенно важно при разработке производств на промышленном уровне. Применение различных методов математического моделирования позволяет упростить поиск оптимальных параметров процесса, увеличить его эффективность, значительно снизить затраты на осуществление масштабного перехода при создании промышленного производства. Модернизация существующего оборудования, а также оптимизация режимов работы технологических схем, могут обеспечить снижение удельных затрат на сырье, топливо, тепло и электроэнергию [19].

Известно множество исследований, в которых для расчета и оптимизации химико-технологических процессов, происходящих в среде сверхкритических флюидов, использовалось моделирование в различных программных пакетах. Так, с

применением моделирования была разработана и масштабирована технология производства сложных полиэфиров из глицерина, который в дальнейшем интегрируется в предприятия по производству биодизеля [20]. В работе [21] проводилось исследование процесса сверхкритической жидкостной экстракции остатков гвоздики и сахарного тростника. В данном исследовании было достигнуто 15-кратное увеличение выхода сырья при переходе от лабораторного эксперимента к пилотной полупромышленной установке. В работе авторов [22] исследуется масштабирование и экономическая целесообразность процесса выделения пребиотических углеводов путем сверхкритической флюидной экстракции. В данном исследовании процесс, оптимизированный в лабораторных масштабах для фракционирования смесей углеводов, полученных ферментативным трансгликозилированием, был масштабирован до промышленного уровня, и его экономическая целесообразность была смоделирована с использованием компьютерного моделирования.

РАСЧЕТ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СХЕМ ПОЛУЧЕНИЯ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ АЭРОГЕЛЕЙ

В данной работе в качестве композиционного материала, для которого проводится расчет технологических схем получения, являются нанопористые гибридные аэрогели с внедренными функциональными соединениями. В основе процесса получения таких материалов лежит метод прямого синтеза функциональных соединений на внутренней поверхности гелей непосредственно в ходе сверхкритической сушки. Наиболее важным для расчета технологической схемы является рассмотрение следующих стадий процесса:

- стадия синтеза функционального соединения на внутренней поверхности гелей;
- стадия сброса растворителя;
- стадия сверхкритической сушки.

В данной работе при расчете технологических схем, подборе параметров оборудования, тепловых расчетов применялся программный пакет CHEMCAD. Он представляет собой инструментальные средства моделирования химико-технологических процессов для решения задач исследования и проектирования химико-технологических систем. Он включает в себя средства статического моделирования основных процессов, основанных на фазовых и химических превращениях, а также средства для расчета геометрических размеров и конструктивных характеристик основных аппаратов, и оценки стоимости оборудования. Программа имеет графический интерфейс. Моделирование

технологических схем происходит с использованием стандартных соотношений и моделей, заложенных в программный пакет.

На рис. 1 приведена объединенная технологическая схема процесса получения нанопористых материалов на основе аэрогелей с внедренными функциональными соединениями, построенная в CHEMCAD, которая включает в себя как контур циркуляции комплексообразователя для обеспечения протекания основной реакции синтеза в аппарате высокого давления, так и контур рекуперации диоксида углерода, для успешной и эффективной работы установки в ходе сверхкритической сушки.

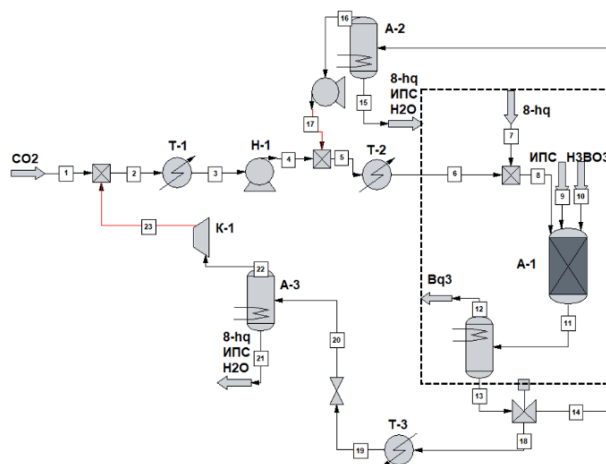


Рис. 1. Общая технологическая схема получения аэрогелей с внедренными функциональными соединениями: 1-23 – материальные потоки, А-1 – аппарат высокого давления, А-2, А-3 – сепараторы, Н-1 – насос высокого давления, К-1 – компрессор, Т-1 – конденсатор, Т-2, Т-3 – теплообменники

Расчет процесса проводится для опытно-промышленной установки, которая состоит из аппарата объемом 70 л, системы рекуперации диоксида углерода, комплекта обвязки и арматуры, системы управления, насосных станций и прочего вспомогательного оборудования. Представленная установка расположена в г. Щелково на производственной площадке ООО «Ниагара».

Параметры ведения процесса: температура процесса 313 К, давление процесса 120 атм, расход среды 150 кг/ч. Далее подробно рассматривается каждая из указанных стадий процесса получения материалов.

Стадия синтеза функционального соединения на поверхности гелей

Для данного этапа получения композиционных материалов необходимо рассчитать количество каждого компонента, участвующего в процессе. В данном исследовании в качестве модельного функционального соединения, которое синте-

зируется на поверхности гелей, является три(8-оксихинолят) бора. Химическая реакция синтеза протекает между катионами B^{3+} и комплексообразователем 8-оксихинолин. Источником катионов B^{3+} могут являться соли и кислоты бора, имеющие высокую растворимость в изопропанол, так как он полностью смешивается со сверхкритическим диоксидом углерода при сушке.

Объем находящегося изопропанола в аппарате высокого давления рассчитывается по формуле:

$$V_{ИПС} = V_{апп} \cdot \varepsilon = 0.07 \cdot 0.7 = 0.049 \text{ м}^3, \quad (1)$$

где $V_{ИПС}$ – объем изопропанола, м^3 ; $V_{апп}$ – объем аппарата, м^3 ; ε – доля загрузки аппарата.

Масса изопропанола рассчитывается по формуле:

$$m_{ИПС} = V_{ИПС} \cdot \rho_{ИПС} \cdot \Phi = 0.049 \cdot 785 = 38.465 \text{ кг}, \quad (2)$$

где $m_{ИПС}$ – масса изопропанола, кг; $\rho_{ИПС}$ – плотность изопропанола, $\text{кг}/\text{м}^3$.

В качестве источника катионов B^{3+} была выбрана борная кислота H_3BO_3 , количество которой рассчитывается по формуле:

$$m_{H_3BO_3} = V_{ИПС} \cdot \rho_{аэр} \cdot \omega_{H_3BO_3} \cdot \Phi = 49 \cdot 0.15 \cdot 0.0005 \cdot 0.95 = 0.00349 \text{ кг} \quad (3)$$

где $m_{H_3BO_3}$ – масса борной кислоты, кг; $\rho_{аэр}$ – плотность получаемого материала, $\text{кг}/\text{м}^3$; $\omega_{H_3BO_3}$ – массовая доля борной кислоты; Φ – пористость получаемого материала.

Необходимое количество комплексообразователя зависит от количества H_3BO_3 , внедренного в гели, и определяется из стехиометрического соотношения, которое составляет 3:1. Необходимо учесть, что комплексообразователь находится в избытке. Его масса рассчитывается по формуле:

$$m_{8-hq} = 3 \cdot \frac{m_{H_3BO_3}}{M_{H_3BO_3}} \cdot \sigma \cdot M_{8-hq} = 3 \cdot \frac{0.00349}{61.83} \cdot 3 \cdot 145.161 = 0.07374 \text{ кг}, \quad (4)$$

где m_{8-hq} – масса комплексообразователя, кг; $M_{H_3BO_3}$ – молярная масса борной кислоты, $\text{кг}/\text{кмоль}$; M_{8-hq} – молярная масса комплексообразователя, $\text{кг}/\text{кмоль}$; σ – коэффициент избытка комплексообразователя.

Технологическая схема стадии синтеза функционального соединения на поверхности гелей приведена ниже (рис. 2).

В ходе процесса гели с H_3BO_3 помещают в аппарат высокого давления А-1, нагретый до температуры ведения процесса. Далее в систему подают углекислый газ с помощью жидкостного насоса Н-1 с заданным расходом через конденсатор

Т-1 и теплообменный аппарат Т-2 для установления требуемых параметров процесса. Аппарат выдерживают 1 ч для уравнивания и синтеза функционального соединения внутри геля.

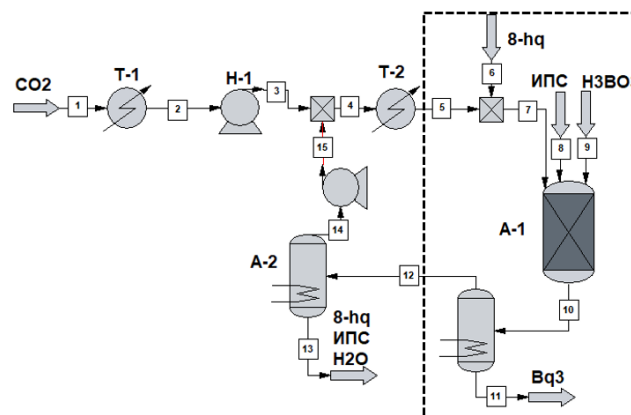


Рис. 2. Технологическая схема стадии синтеза функциональных соединений на поверхности гелей: 1-15 – материальные потоки, А-1 – аппарат высокого давления, А-2 – сепаратор, Н-1 – насос высокого давления, Т-1 – конденсатор, Т-2 – теплообменник

Энергозатраты на стадию синтеза функционального соединения на поверхности гелей рассчитываются по формуле:

$$Q_I = (q_{T-1} + q_{H-1} + q_{T-2}) \cdot \tau_I, \quad (5)$$

где Q_I – количество затрачиваемой энергии технологической схемы на стадии синтеза, $\text{кВт} \cdot \text{ч}$; q_{T-1} – количество затрачиваемой мощности Т-1, кВт ; q_{H-1} – количество затрачиваемой мощности Н-1, кВт ; q_{T-2} – количество затрачиваемой мощности Т-2, кВт ; τ_I – время процесса, ч.

Стадия сброса растворителя

На данном этапе наблюдается вытеснение изопропанола из свободного объема аппарата. Для этого протоком через аппарат подается сверхкритический диоксид углерода. Так как моделирование производится в квазистационарном режиме, то для учета влияния спирта необходимо провести серию расчетов с разным его содержанием в потоке. На рис. 3 приведена технологическая схема, которая соответствует стадии сброса растворителя из свободного объема аппарата.

С целью расчета изменения содержания изопропанола внутри аппарата А-1 в технологической схеме перед поступлением в автоклав в технологическую схему добавлен поток 6, который смешивается с потоком 5 диоксида углерода и поступает в аппарат А-1. Содержание спирта в потоке убывает по линейной зависимости, и в течение 1 ч изопропанол полностью вытесняется из свободного объема аппарата. Для оценки влияния

изопропанола на параметры процесса рассматривается изменение температуры потока 10 после дросселирования.

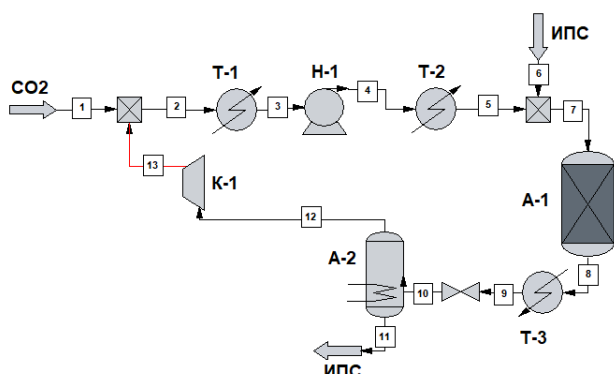


Рис. 3. Технологическая схема стадии сброса растворителя: 1-13 – материальные потоки, А-1 – аппарат высокого давления, А-2 – сепаратор, Н-1 – насос высокого давления, Т-1 – конденсатор, Т-2, Т-3 – теплообменники

Увеличение содержания изопропанола в потоке 8, выходящем из аппарата А-1, увеличивает температуру потока 10 после дросселирования. Процесс дросселирования потока со 120 до 10 атм сопровождается резким снижением температуры. Важно поддерживать такую температуру потока 10, чтобы диоксид углерода находился в газообразном состоянии и не сжижался. На текущей стадии температура поддерживается на отметке 262.9 К. Таким образом, на начальных этапах процесса необходимо подводить меньше тепла к теплообменнику Т-3, необходимого для подогрева потока 9 перед дросселированием.

Энергозатраты теплообменника Т-3 рассчитываются по формуле:

$$Q_{T-3} = \sum_{i=1}^5 q_i \cdot \tau_i, \quad (6)$$

где Q_{T-3} – энергозатраты теплообменника Т-3 на стадии сброса растворителя, кВт·ч; q_i – энергозатраты теплообменника на каждом этапе сброса растворителя, кВт; τ_i – время каждого этапа сброса растворителя, равное 0.2 часа.

Энергозатраты на стадию сброса растворителя рассчитываются по формуле:

$$Q_{II} = (q_{T-1} + q_{H-1} + q_{T-2} + q_{K-1}) \cdot \tau_I + Q_{T-3}, \quad (7)$$

где Q_{II} – количество затрачиваемой энергии технологической схемы на стадии сброса растворителя, кВт·ч; τ_{II} – время процесса, ч.

Стадия сверхкритической сушки

После этапа сброса растворителя из свободного объема аппарата содержание органического растворителя сосредоточено в первую очередь в пористом теле (геле) и застойных зонах аппарата.

Наступает этап процесса, в котором основной вклад несет диффузионный массоперенос в пористом теле. Технологическая схема процесса сверхкритической сушки материалов приведена далее (рис. 4).

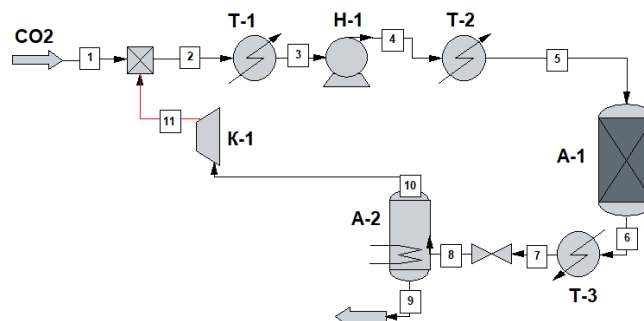


Рис. 4. Технологическая схема стадии сверхкритической сушки гелей с внедренными функциональными соединениями: 1-11 – материальные потоки, А-1 – аппарат высокого давления, А-2 – сепаратор, Н-1 – насос высокого давления, К-1 – компрессор,

Т-1 – конденсатор, Т-2, Т-3 – теплообменники

В автоклаве высокого давления А-1 происходит сушка влажных гелей при температуре 313 К и давлении 40 атм. На выходе из аппарата поток диоксида углерода и спирта нагревается до 363 К, а затем происходит его дросселирование, и его давление снижается до 10 атм. После разделения поток спирта поступает в емкость для хранения, а поток диоксида углерода поступает в компрессор К-1, где его давление нагнетается до 40 атм. Затем происходит его охлаждение до 278 К с помощью конденсатора Т-1. Далее давление диоксида углерода с помощью насоса Н-1 нагнетается до рабочего, в теплообменнике Т-2 происходит нагрев до рабочей температуры, и осуществляется возврат углекислого газа на рецикл. Общее время процесса составляет 8 ч. На данной стадии моделируются потоки чистого диоксида углерода без учета изопропанола, который циркулирует по замкнутому контуру. Расход диоксида углерода в каждом потоке составляет 150 кг/ч. Энергозатраты на стадию сверхкритической сушки рассчитываются по формуле:

$$Q_{III} = (q_{T-1} + q_{H-1} + q_{T-2} + q_{T-3} + q_{K-1}) \cdot \tau_{III}, \quad (8)$$

где Q_{III} – количество затрачиваемой энергии технологической схемы на стадии сверхкритической сушки, кВт·ч; τ_{III} – время процесса, ч.

Повышение эффективности стадии сверхкритической сушки за счет изменения аппаратного оформления технологической схемы

При прохождении потока диоксида углерода через компрессор К-1 (рис. 4) его давление

резко увеличивается с 10 до 40 бар. Компримирование газа сопровождается повышением его температуры и требует последующего охлаждения. Такой поток обладает большим количеством тепла, которое может быть использовано в целях повышения энергоэффективности технологической схемы процесса. Рис. 5 иллюстрирует технологическую схему, в которой часть тепла потока после компримирования диоксида углерода расходуется на предварительный подогрев смеси, выходящей из аппарата высокого давления.

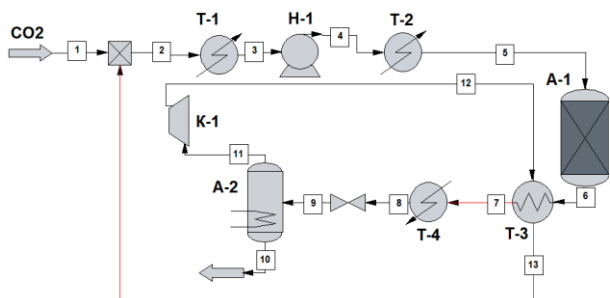


Рис. 5. Технологическая схема установки сверхкритической сушки с использованием тепла после компримирования:
1-13 – материальные потоки,
A-1 – аппарат высокого давления, A-2 – сепаратор,
H-1 – насос высокого давления,
K-1 – компрессор, T-1 – конденсатор, T-2, T-3, T-4 – теплообменники

Предварительный подогрев смеси выходящей из аппарата A-1 происходит в теплообменнике T-3. При применении данной схемы возможно снижение энергетических затрат на обогрев потока 6 перед дросселированием. Так как часть энергии затрачивается на обогрев потока 6, то на выходе из теплообменника T-3 поток 13 имеет меньшую температуру. Следовательно, для его охлаждения необходим охладитель с меньшей холодопроизводительностью, что также уменьшает затраты энергии. Таким образом, возможно снижение энергозатрат на нагрев потока 6 и на охлаждение потока 2.

Энергозатраты на стадию сверхкритической сушки с использованием тепла после компримирования рассчитываются по формуле:

$$Q_{III-2} = (q_{T-1} + q_{H-1} + q_{T-2} + q_{T-4} + q_{K-1}) \cdot \tau_{III}, \quad (9)$$

где Q_{III-2} – количество затрачиваемой энергии технологической схемы на стадии сверхкритической сушки с использованием тепла после компримирования, кВт·ч.

Общее количество затрачиваемой энергии на процесс получения аэрогеля с внедренным функциональным соединением рассчитывается по формуле:

$$Q = Q_I + Q_{II} + Q_{III}, \quad (10)$$

где Q – количество затрачиваемой энергии на процесс получения аэрогеля с внедренным функциональным соединением, кВт·ч.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

По окончании моделирования технологической схемы стадии синтеза функциональных соединений на поверхности гелей, приведенной на рис. 2, получены значения характеристик входных и выходных потоков, а также энергозатраты каждой единицы оборудования. Результаты представлены в табл. 1 и 2 соответственно.

Таблица 1
Характеристики потоков технологической схемы

Поток	T, К	P, атм	v, кг/ч
1	298	40	150
2	276	40	150
3	285.6	120	150
4	285.6	120	150
5	313	120	150
6	313	120	0.074
7	313	120	150.07
8	313	120	38.465
9	313	120	0.0035
10	313	120	188.54
11	313	120	0.025
12	313	120	188.52
13	313	120	38.52
14	313	120	150
15	313	120	150

Таблица 2
Энергозатраты оборудования технологической схемы

Наименование оборудования	Затрачиваемая мощность, кВт
T-1	1.05
H-1	0.47
T-2	3.37

Энергозатраты на стадию синтеза функционального соединения на поверхности гелей, рассчитанные по уравнению 5, составили 4.89 кВт·ч.

В табл. 3 сведены значения температуры потока 9 в зависимости от содержания изопропанола в свободном объеме аппарата, необходимые для оценки влияния растворителя на параметры ведения процесса, которые получены по результатам моделирования технологической схемы, представленной на рис. 3.

Далее представлены значения затрачиваемой мощности для каждой единицы оборудования стадии сброса растворителя (табл. 4).

Таблица 3

Результаты расчета влияния изопропанола на стадии сброса растворителя

Доля ИПС в А-1, %	Расход ИПС в потоке 6, кг/ч	Температура перед дросселированием в потоке 9, К	Температура после дросселирования в потоке 10, К
50	38.465	349.5	262.9
40	30.772	350.8	
30	23.079	352.3	
20	15.386	354.2	
10	7.693	355.6	
0	0	363	

Таблица 4

Энергозатраты оборудования технологической схемы

Наименование оборудования	Затрачиваемая мощность, кВт
Т-1	6.12
Н-1	0.46
Т-2	3.42
К-1	3.77

Рассчитанное значение энергозатрат теплообменника Т-3 по уравнению 6 составило 6.7 кВт·ч.

Энергозатраты на стадию сброса растворителя, рассчитанные по уравнению 7, составили 20.47 кВт·ч.

Результатом моделирования процесса на стадии сверхкритической сушки (рис. 4) являются рассчитанные значения потоков технологической схемы (табл. 5) и энергозатрат каждой единицы оборудования (табл. 6). По полученным данным рассчитываются энергозатраты, необходимые для осуществления процесса.

Таблица 5

Характеристики потоков технологической схемы

Поток	Т, К	Р, атм
2	381.3	40
3	276	40
4	285.5	120
5	313	120
6	313	120
7	363	120
8	262.9	10
10	262.9	10
11	381.3	40

Энергозатраты на стадию сверхкритической сушки, рассчитанные по уравнению 8, составили 164.64 кВт·ч.

В табл. 7 сведены параметры потоков технологической схемы с использованием тепла после компримирования (рис. 5). Расход диоксида углерода в каждом потоке составляет 150 кг/ч.

Таблица 6

Энергозатраты оборудования технологической схемы

Наименование оборудования	Затрачиваемая мощность, кВт
Т-1	6.12
Н-1	0.46
Т-2	3.42
Т-3	6.81
К-1	3.77

Таблица 7

Характеристики потоков технологической схемы

Поток	Т, К	Р, атм
2	329	40
3	276	40
4	285.6	120
5	313	120
6	313	120
7	327	120
8	363	120
9	263.1	10
11	263.1	10
12	381.6	40
13	329	40

Далее представлены значения затрачиваемой мощности для каждой единицы оборудования (табл. 8).

Таблица 8

Энергозатраты оборудования технологической схемы

Наименование оборудования	Затрачиваемая мощность, кВт
Т-1	5.19
Н-1	0.46
Т-2	3.42
Т-4	4.39
К-1	3.77

Энергозатраты на стадию сверхкритической сушки с использованием тепла после компримирования, рассчитанные по уравнению 9, составили 137.84 кВт·ч.

Ниже (таблица 9) сведены энергозатраты на каждую стадию технологической схемы процесса формирования нанопористых гибридных аэрогелей с функциональными соединениями методом прямого синтеза, а также суммарные энергоза-

траты в зависимости от аппаратного оформления, рассчитанные по уравнению 10.

Таблица 9

Энергетические затраты технологической схемы процесса формирования нанопористых гибридных аэрогелей с функциональными соединениями методом прямого синтеза

Варианты схемы	Q_I , кВт·ч	Q_{II} , кВт·ч	Q_{III} , кВт·ч	Q , кВт·ч
Стадия СКС без использования тепла после компримирования	4.89	20.47	164.64	190
Стадия СКС с использованием тепла после компримирования			137.84	163.2

Применение схемы с использованием тепла после компримирования демонстрирует снижение суммарных энергетических затрат, необходимых на осуществление процесса по приведенным технологическим схемам. Для осуществления такой схемы необходим дополнительный теплообменник, который вносит незначительный вклад в капитальные вложения. Уменьшение энергетических

затрат на весь процесс по сравнению с исходной технологической схемой составило 14.1%.

ВЫВОДЫ

В данной работе был предложен способ моделирования технологической схемы процесса формирования нанопористых гибридных аэрогелей с функциональными соединениями методом прямого синтеза. Была разработана математическая модель с использованием программного пакета CHEMCAD, позволяющего строить материальный и тепловой балансы как отдельных аппаратов, так и технологической схемы в целом. По разработанной модели рассчитаны характеристики потоков и энергозатраты оборудования для каждой стадии процесса. На основе математической модели определен энерго- и ресурсоэффективный способ технологического оформления стадии сверхкритической сушки. Установлено уменьшение энергетических затрат технологической схемы с использованием тепла после компримирования.

Данный подход позволяет прогнозировать на этапе проектирования основные характеристики и особенности функционирования химико-технологических систем в реальных условиях производства, а также масштабировать технологические процессы и может быть использован во всех областях химической промышленности.

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

- Gibiat V., Lefevre O., Woignier T., Pelous J., Phalippou J. Journal of Non-Crystalline Solids. 1995. V. 186. P. 244–255.
- Hanzawa Y., Kaneko K., Pekala R. W., Dresselhaus M. S. Langmuir. 1996. V. 12. P. 6167 – 6169.
- Buratti C. Energy and Buildings. 2017. V. 152. P. 472–482.
- Xu F., Xu J., Xu H. Energy Storage Materials. 2017. V. 7. P. 8–16.
- Yang F., Zhu J., Zou X. Ceramics International. 2018. V. 44. N 1. P. 1078–1085.
- Anas M., Gönel A.G., Bozbag S.E., Erkey C. Journal of CO₂ Utilization. 2017. V. 21. P. 82–88.
- Khoshnevis H., Mint S. M., Yedinak E. Chemical Physics Letters. 2018. V. 693. P. 146–151.
- Hajime T., Hajime I., Yamamoto T., Suzuki T. Drying Technology. 2016. V. 19. P. 313 – 324.
- Hirashima H., Kojima C., Kohama K., Imai H. J. Sol-Gel Sci. Techn. 1997. V. 8. P. 843–846.
- Perez-Caballero F., Peikolaian A.-L., Uibu M., Kuusik R., Volobujeva O., Koel M. Microporous and Mesoporous Materials. 2017. V. 108. P. 230 – 236.
- Maleki H., Duraes L., Portugal A. Journal of Non-Crystalline Solids. 2018. V. 385. P. 55–74.

REFERENCES

- Gibiat V., Lefevre O., Woignier T., Pelous J., Phalippou J. Journal of Non-Crystalline Solids. 1995. V. 186. P. 244–255.
- Hanzawa Y., Kaneko K., Pekala R. W., Dresselhaus M. S. Langmuir. 1996. V. 12. P. 6167 – 6169.
- Buratti C. Energy and Buildings. 2017. V. 152. P. 472–482.
- Xu F., Xu J., Xu H. Energy Storage Materials. 2017. V. 7. P. 8–16.
- Yang F., Zhu J., Zou X. Ceramics International. 2018. V. 44. N 1. P. 1078–1085.
- Anas M., Gönel A.G., Bozbag S.E., Erkey C. Journal of CO₂ Utilization. 2017. V. 21. P. 82–88.
- Khoshnevis H., Mint S. M., Yedinak E. Chemical Physics Letters. 2018. V. 693. P. 146–151.
- Hajime T., Hajime I., Yamamoto T., Suzuki T. Drying Technology. 2016. V. 19. P. 313 – 324.
- Hirashima H., Kojima C., Kohama K., Imai H. J. Sol-Gel Sci. Techn. 1997. V. 8. P. 843–846.
- Perez-Caballero F., Peikolaian A.-L., Uibu M., Kuusik R., Volobujeva O., Koel M. Microporous and Mesoporous Materials. 2017. V. 108. P. 230 – 236.
- Maleki H., Duraes L., Portugal A. Journal of Non-Crystalline Solids. 2018. V. 385. P. 55–74.

12. *Camargo P., Satyanarayana K., Wypych F.* Mater. Res. 2009. V. 12. P. 1–39.
13. *Hyung Min Kim, Ye Ji Noh, Jaesang Yu, Seong Yun Kim, Jae Ryoum Youn.* Composites Part A: Applied Science and Manufacturing. 2015. V.75. P. 39–45.
14. *Koebel M., Rigacci A., Achard P.* J Sol-Gel Sci Technol. 2012. V. 63 (3). P. 315–339
15. *Akimov Y. K.* Instruments and Experimental Techniques. 2003. V. 46. N 3. P. 287–299.
16. *Dorcheh A. S., Abbasi M. H.* Journal of Materials Processing Technology. 2016 V. 199. N 1-3. P. 10–26.
17. *Akimov Y. K.* Instruments and Experimental Techniques. 2003. V. 46. N 3. P. 287–299.
18. *Dorcheh A. S., Abbasi M. H.* Journal of Materials Processing Technology. 2016 V. 199. N 1-3. P. 10–26.
19. *Гумерова Г.И., Нуретдинов Р.Р., Режевски П., Копитовски Е., Гумеров Ф.М.* Вестник Казанского технологического университета. 2003. № 2.
20. *Рыжов Д.А., Шакирова А.М., Кошкина Л.Ю.* Вестник Казанского технологического университета. 2016. № 18.
21. *E. Torres-Ramón, C.M. García-Rodríguez, K.H. Estévez-Sánchez, I.I. Ruiz-López, G.C. Rodríguez-Jimenes, G. Romero de la Vega, M.A. García-Alvarado.* The Journal of Supercritical Fluids. 2021. V. 170. 105160.
22. *Yong-qiang Feng, Wei Zhang, Hassan Niaz, Zhi-xia He, Shuang Wang, Xin Wang, Yu-zhuang Liu.* Energy Conversion and Management. 2021. V. 212. 112773.
12. *Camargo P., Satyanarayana K., Wypych F.* Mater. Res. 2009. V. 12. P. 1–39.
13. *Hyung Min Kim, Ye Ji Noh, Jaesang Yu, Seong Yun Kim, Jae Ryoum Youn.* Composites Part A: Applied Science and Manufacturing. 2015. V.75. P. 39–45.
14. *Koebel M., Rigacci A., Achard P.* J Sol-Gel Sci Technol. 2012. V. 63 (3). P. 315–339
15. *Akimov Y. K.* Instruments and Experimental Techniques. 2003. V. 46. N 3. P. 287–299.
16. *Dorcheh A. S., Abbasi M. H.* Journal of Materials Processing Technology. 2016 V. 199. N 1-3. P. 10–26.
17. *Akimov Y. K.* Instruments and Experimental Techniques. 2003. V. 46. N 3. P. 287–299.
18. *Dorcheh A. S., Abbasi M. H.* Journal of Materials Processing Technology. 2016 V. 199. N 1-3. P. 10–26.
19. *Gumerova G. I., Nuretdinov R. R., Rezhevski P., Kopitovski E., Gumerov F. M.* Vestnik Kazanskogo tekhnologicheskogo universiteta. 2003. N 2.
20. *Ryzhov D.A., Shakirova A.M., Koshkina L.Y.* Vestnik Kazanskogo tekhnologicheskogo universiteta. 2016. N 18.
21. *E. Torres-Ramón, C.M. García-Rodríguez, K.H. Estévez-Sánchez, I.I. Ruiz-López, G.C. Rodríguez-Jimenes, G. Romero de la Vega, M.A. García-Alvarado.* The Journal of Supercritical Fluids. 2021. V. 170. 105160.
22. *Yong-qiang Feng, Wei Zhang, Hassan Niaz, Zhi-xia He, Shuang Wang, Xin Wang, Yu-zhuang Liu.* Energy Conversion and Management. 2021. V. 212. 112773.

*Поступила в редакцию 14.12.2022
Принята к опубликованию 06.03.2023*

*Received 14.12.2022
Accepted 06.03.2023*