



ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

**VII Всероссийская школа-конференция
молодых учёных**

«Сверхкритические флюидные технологии
в решении экологических проблем:
создание перспективных материалов»

13-15 сентября 2016 г.
г. Архангельск

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**
**СЕВЕРНЫЙ (АРКТИЧЕСКИЙ) ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ
М.В. ЛОМОНОСОВА**
**МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ
М.В. ЛОМОНОСОВА**
РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
**ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР КОМПЛЕКСНОГО
ИЗУЧЕНИЯ АРКТИКИ**
**ИНСТИТУТ ОБЩЕЙ И НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ ИМЕНИ
Н.С.КУРНАКОВА**
РОССИЙСКИЙ ФОНД ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ
ЖУРНАЛ «СВЕРХКРИТИЧЕСКИЕ ФЛЮИДЫ: ТЕОРИЯ И ПРАКТИКА»

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

**VII Всероссийской школы-конференции
молодых учёных**

**Сверхкритические флюидные технологии
в решении экологических проблем: создание
перспективных материалов**

13 – 15 сентября 2016 г.

г. Архангельск

УДК 54
ББК 24
Т 29

Т 29 Тезисы докладов. VII Всероссийской школе-конференции молодых учёных «Сверхкритические флюидные технологии в решении экологических проблем: создание перспективных материалов» 13-15 сентября 2016 г. / Под. ред.: Членов редколлегии журнала «Сверхкритические флюиды: теория и практика». – М.: «Белый Ветер», 2016. – 170 с.

ISBN 978-5-905714-94-8

В сборнике собраны тезисы докладов, представленных на VII Всероссийской школе-конференции молодых учёных «Сверхкритические флюидные технологии в решении экологических проблем: создание перспективных материалов», состоявшейся 13-15 сентября 2016 года в г. Архангельске. Научная программа школы-конференции включала в себя лекции ведущих специалистов в области сверхкритических сред, а также доклады молодых ученых.

Книга предназначена для учёных, работающих в области сверхкритических флюидных технологий, а также для аспирантов и студентов.

**УДК 54
ББК 24**

Подписано в печать 26.07.2016. Формат 70x108/16. Усл. п.л. 10,62.

Тираж 500 экз. Заказ 20160726

ООО «Типография «Семейный бизнес», 141080, Московская область,
г. Королев, ул. Стадионная, д. 7, офис 16, Тел.: (495) 778-80-73

ISBN 978-5-905714-94-8

Организаторы:

Министерство образования и науки РФ
Северный (Арктический) федеральный университет имени М.В.Ломоносова
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
Российская академия наук
Федеральный исследовательский центр комплексного изучения Арктики
Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова
Российский фонд фундаментальных исследований
Журнал «Сверхкритические флюиды: Теория и Практика»

Председатель – Лунин Валерий Васильевич, доктор хим. наук, академик РАН, декан химического факультета Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова, Москва

Оргкомитет:

Баграташвили В.Н., доктор физ.-мат. наук, профессор, Троицк

Боголицын К.Г., доктор хим. наук, профессор, Архангельск

Варфоломеев С.Д., доктор хим. наук, член-корреспондент РАН, Москва

Золотов Ю.А., доктор хим. наук, академик РАН, Москва

Шевельков А.В., доктор хим. наук, профессор, Москва

Горбова Н.С., кандидат хим. наук, доцент, Архангельск

Иванченко Н.Л., кандидат хим. наук, Архангельск

Паренаго О.О., кандидат хим. наук, Москва

Скребец Т.Э., кандидат хим. наук, доцент, Архангельск

КОНВЕКТИВНАЯ ДИФФУЗИЯ ПРИ СВЕРХКРИТИЧЕСКОЙ ФЛЮИДНОЙ ЭКСТРАКЦИИ ИЗ ПОЛИДИСПЕРСНОГО ЗЕРНИСТОГО СЛОЯ

А.А. Саламатин, Э.О. Митягина

Казанский (Приволжский) федеральный университет, г. Казань.

В рамках модели сужающегося ядра исследуется влияние на кинетику сверхкритической флюидной экстракции (СФЭ) конвективной диффузии двухкомпонентного раствора при его фильтрации через бидисперсный зернистый слой молотого масличного сырья. На основе известных полуэмпирических корреляционных формул показано, что при типичных лабораторных условиях экстракции влияние конвективной диффузии на интегральные характеристики процесса не превосходит 10%. Максимум возмущения соответствует промежуточному этапу краткосрочного перехода с начального, линейного, этапа экстракции на завершающий, нелинейный. Отмечено, что наблюдаемый эффект в той же мере может быть описан при незначительном изменении кажущегося размера частиц мелкодисперсной фракции.

При фильтрации растворов в пористых средах существенными могут оказаться пульсационные составляющие поля скорости двухфазной системы, что также свойственно и для процесса сверхкритической флюидной экстракции (СФЭ). На макроуровне описания явления это приводит к возникновению так называемого эффекта конвективной диффузии (дисперсии) [1, 2], описываемого в терминах коэффициента D_{ax} . В представленной работе проводится оценка возмущения количественных характеристик процесса, вызванная этим эффектом, в условиях лабораторного эксперимента по СФЭ из молотых семян масличных культур.

Традиционно осредненная по сечению аппарата модель процесса на макроуровне формулируется в одномерном приближении [2-5]. При этом

ось Oz направлена вдоль средней скорости v переноса раствора (скорости фильтрации). Уравнение баланса массы в поровом пространстве аппарата в монодисперсном ($n = 1$) и бидисперсном приближении ($n = 2$), выраженное в терминах массовой концентрации $0 \leq c \leq 1$ экстрактивных веществ в порах аппарата, нормированной на концентрацию насыщения раствора, примет следующий вид:

$$e \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} \left(vc - D_{ax} \frac{\partial c}{\partial z} \right) = 3(1-e) \sum_{i=1}^n \frac{q(a_i, z, t)}{a_i} f_i, \quad \sum_{i=1}^n f_i = 1.$$

Здесь e – пористость зернистого слоя, t – время, q – массовый поток экстрактивных веществ с поверхности молотых частиц, составляющих слой. Последние рассматриваются в сферическом приближении, радиус обозначен через a_i , $i = 1, 2$, $a_1 < a_2$, а объемная доля каждой фракции – f_i .

Поток q целевых соединений определяется микромоделью массопереноса, сформулированной для индивидуальной частицы сырья. В данной работе принята модель сужающегося ядра (SC) [2, 5], уравнение (1). Ее основные положения подразумевают высокую проницаемость клеточных стенок и высокие начальные запасы масла в сырье [2, 5].

Сформулированные ограничения позволяют рассматривать внешнюю подмодель в квазистационарном приближении, а полная формулировка балансовых соотношений модели в безразмерных переменных принимает следующий вид:

$$\frac{\partial c}{\partial \zeta} - \delta_{ax} \frac{\partial^2 c}{\partial \zeta^2} = \sum_{i=1}^n \frac{\partial s_i}{\partial \tau} f_i, \quad \delta_{ax} = 6(1-e) \frac{D_{eff} D_{ax}(a_n)}{a_1^2 v^2},$$

$$\frac{\partial s_i}{\partial \tau} = \frac{\lambda(s_i)}{\xi_i^2} (1-c), \quad s_i = 1 - \left(\frac{R_i}{a_i} \right)^3, \quad \lambda(s) = \max \left\{ 0, \frac{0.5(1-s)^{1/3}}{1-(1-s)^{1/3}} \right\}. \quad (1)$$

Здесь $0 \leq s \leq 1$ – объемная доля масла, извлеченного из частицы, а D_{eff} – коэффициент эффективной диффузии масла в частицах. Безразмерные переменные $\zeta = z / z_{sc}$, $\tau = t / t_{sc}$ и $\xi_i = a_i / a_{sc}$, нормированы на характерные масштабы [2]

$$z_{sc}(a_{sc}) = \frac{va_{sc}^2}{6D_{eff}(1-e)}, \quad t_{sc}(a_{sc}) = \frac{\theta_0}{\theta_*} \frac{a_{sc}^2}{6D_{eff}}, \quad a_{sc} = a_1.$$

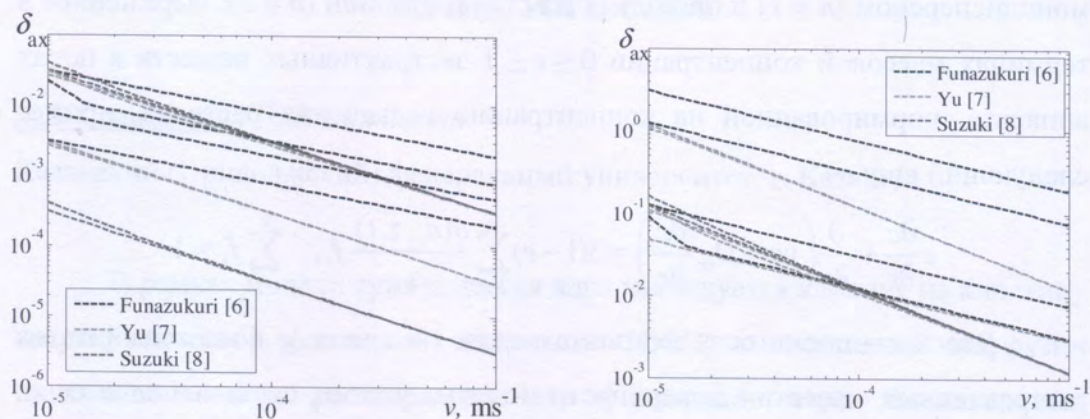


Рис. 1. Значения δ_{ax} для монодисперсных (слева) и бидисперсных при $a_1 = 50 \mu\text{m}$ сред (справа). Линии одного цвета соответствуют разным комбинациям предельных значений a_n и D_{12} (см. текст).

Полная модель СФЭ в бидисперсном приближении определяется всего четырьмя параметрами: дисперсионным числом δ_{ax} , фракционным составом f_1 , и относительными временами $\eta_i = H / z_{sc}(a_i)$ экстракции частиц, где H – высота аппарата. Для оценки характерных значений δ_{ax} использовались корреляционные зависимости [6-8], а характерные значения η_i вычислялись на основе результатов апробации модели SC [5, 9] для условий, типичных для лабораторных экспериментов по СФЭ: коэффициент молекулярной диффузии D_{12} по порядку равен $10^{-9} - 10^{-8} \text{ м}^2\text{с}^{-1}$, а размер a_n основной фракции частиц – 100 – 1000 мкм.

Область характерных изменений параметра δ_{ax} для монодисперсных и бидисперсных сред представлена на Рис. 1. Разнообразие экспериментальных условий в работах [6-8] приводит к сильному разбросу значений дисперсионного числа.

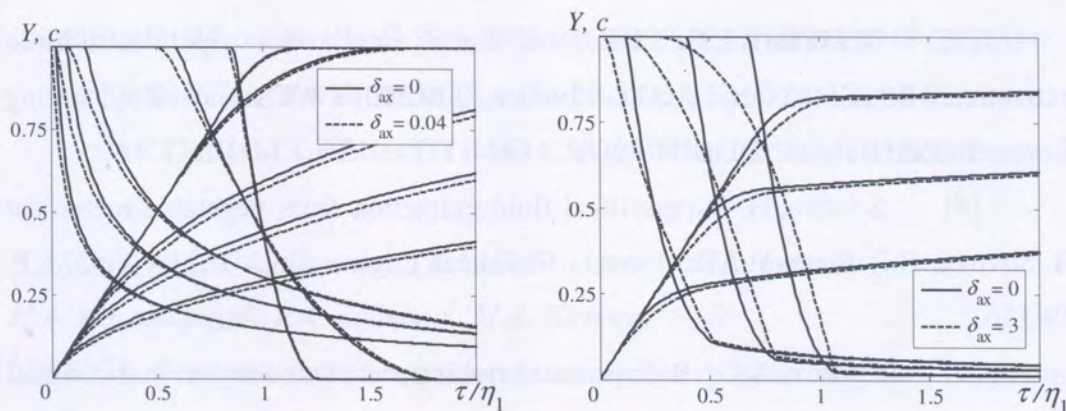


Рис. 2. КВМ Y и выходная концентрация c вычисленная для предельных значений δ_{ax} в случае монодисперсных (слева) и бидисперсных (справа) сред.

Численные расчеты при максимальных значениях дисперсионного числа $\max \delta_{ax} (\nu = 10^{-5} \text{ мс}^{-1})$ показывают, что как в монодисперсном приближении, так и в более реальном, бидисперсном, возмущение, вызванное эффектом конвективной диффузии, незначительно при определении интегральной характеристики процесса – кривой выхода масла Y (рис. 2). В тоже время относительные изменения выходной концентрации c могут возмущаться существенно. Отметим также, что в бидисперсном приближении варьирование размера частиц мелкодисперсной фракции приводит к тому же макроскопическому эффекту, что и учет конвективной диффузии – изменяется кривизна переходного этапа экстракции [5].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и Республики Татарстан, проекты 15-41-02542 р_поволжье_a и 16-31-00007 мол_a.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Хейфец, Л.И., Неймарк, А.В. Многофазные процессы в пористых средах, М.: Химия, 1982. - 320 с.
- [2] Математическая модель экстрагирования семян масличных культур сверхкритическим диоксидом углерода / Р.Н. Максудов, А.Г. Егоров, А.Б. Мазо и др. // Сверхкритические флюиды: теория и практика. - 2008.- Т. 3, № 2.- С. 20-32.

- [3] Oliveira, E.L.G. Review of kinetic models for supercritical fluid extraction / E.L.G. Oliveira, A.J.D. Silvestre, C.M. Silva // Chemical Engineering Research and Design.- 2011.- V. 89.- P. 1104-1117.
- [4] Sovova, H. Supercritical fluid extraction from vegetable materials/ H. Sovova, R.P. Stateva // Reviews in Chemical Engineering.- 2011.- V. 27.- P. 79-156.
- [5] Egorov, A.G. Bidisperse shrinking core model for supercritical fluid extraction / A.G. Egorov, A.A. Salamatin // Chemical Engineering and Technology.- 2015.- V.38.- P. 1203-1211.
- [6] Funazukuri, T. Effective axial dispersion coefficients in packed beds under supercritical conditions / T. Funazukuri, Ch. Kong, S. Kagei //The Journal of Supercritical Fluids. - 1998. - V. 13. - P. 169-175.
- [7] Yu, D. Dispersion and diffusion in porous media under supercritical conditions / D. Yu, K. Jackson, T.C. Harmon // Chemical Engineering Science.- 1999.- V. 54.- P. 357-367.
- [8] Suzuki, M. Axial Dispersion in Beds of Small Particles / M. Suzuki, J.M. Smith // The Chemical Engineering Journal.- 1972.- V. 3.- P. 256-264.
- [9] Егоров, А.Г. Экстракция полидисперсного зернистого слоя молотых семян масличных культур сверхкритическим диоксидом углерода / А.Г. Егоров, А.Б. Мазо, Р.Н. Максудов // Теоретические основы химической технологии. - 2010.- Т. 44, № 5.- С. 498-506

Министерство образования и науки Российской Федерации
Северный (Арктический) федеральный университет имени М.В. Ломоносова
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
Российская академия наук
Федеральный исследовательский центр комплексного изучения Арктики
Институт общей и неорганической химии имени Н.С. Курнакова
Российский фонд фундаментальных исследований
Журнал «Сверхкритические флюиды: теория и практика»



VII Всероссийская школа-конференция
молодых ученых
**«Сверхкритические флюидные технологии
в решении экологических проблем:
создание перспективных материалов»**

Архангельск, 13 – 15 сентября 2016 г.

163002, г. Архангельск, наб.
Северной Двины, 17
Северный (Арктический)
федеральный университет
имени М.В. Ломоносова
e-mail: scf-Arch@yandex.ru
тел.: (8182) 21-89-48
факс: (8182) 21-89-48

Казанский (Приволжский) федеральный университет
Аспиранту кафедры аэрогидромеханики
Саламатину А.А.

«22» августа 2016 г.

ПРИГЛАШЕНИЕ

Уважаемый Артур Андреевич!

Приглашаем Вас принять участие в работе VII Всероссийской школы-конференции молодых ученых «Сверхкритические флюидные технологии в решении экологических проблем: создание перспективных материалов», которая пройдет в период с 13 по 15 сентября 2016 года в г. Архангельск с устным докладом «Конвективная диффузия при сверхкритической флюидной экстракции из полидисперсного зернистого слоя».

Доклад включен в программу конференции.

С уважением,
сопредседатель оргкомитета,
д.х.н., профессор

Handwritten signature of K.G. Bogolyubin in blue ink.

К.Г. Боголицын



ДИПЛОМ

*Саламатин
Артур Андреевич*

За участие в VII Всероссийской школе-конференции
молодых учёных
«Сверхкритические флюидные технологии в решении
экологических проблем:
создание перспективных материалов»

13 – 15 сентября 2016 года, город Архангельск

Председатель оргкомитета
академик РАН



В.В.Лунин

