

Резюме проекта, выполняемого

в рамках ФЦП

«Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014 – 2020 годы»

по этапу № 1

Номер Соглашения о предоставлении субсидии: 14.586.21.0028

Тема: «Новое поколение нанопористых органических и гибридных аэрогелей для промышленного применения: от лаборатории к промышленному производству»

Приоритетное направление: Индустрия наносистем (ИН)

Критическая технология: Нано-, био-, информационные, когнитивные технологии

Период выполнения: 03.06.2016 - 31.12.2018

Плановое финансирование проекта: 56.00 млн. руб.

Бюджетные средства 28.00 млн. руб.,

Внебюджетные средства 28.00 млн. руб.

Получатель: федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева"

Участник Консорциума: Ассоциация по исследованию и разработке производственных процессов

Участник Консорциума: Университет г. Патрас

Участник Консорциума: Технический университет г. Гамбурга

Участник Консорциума: Арселик

Участник Консорциума: Драгер

Участник Консорциума: Нестек Йорк, Нестле

Участник Консорциума: Университет г. Афины

Участник Консорциума: "Инвентия"

Участник Консорциума: БАСФ

Участник Консорциума: Институт материаловедения, Германский центр авиации и космонавтики

Участник Консорциума: Университет г. Кос

Ключевые слова: сверхкритические технологии, сверхкритические флюиды, наноматериалы, аэрогели, моделирование, масштабирование, клеточные автоматы, механика сплошных сред, вычислительная гидродинамика

1. Цель проекта

Проект направлен на разработку электронной модели установки и временного (пускового) технологического регламента первого опытного полупромышленного производства нового поколения многофункциональных нанопористых органических и гибридных аэрогелей для применения в качестве адсорбентов токсичных промышленных газов, для контроля параметров микроклимата в замкнутых помещениях, при производстве товаров народного потребления и в пищевой промышленности.

2. Основные результаты проекта

На первом этапе работ были проведены аналитический обзор современной научно-технической, нормативной, методической литературы и патентный поиск с целью анализа существующих способов получения аэрогелей и возможностей их применения, обоснования выбора технических, конструкторских решений необходимых для создания опытного полупромышленного производства аэрогелей. Патентный поиск был оформлен в виде отчета о патентных исследованиях в соответствии с требованиями ГОСТ 5.11-96. Данные работы позволили подготовить теоретическую базу для решения поставленных задач проекта, в особенности связанных с построением структур аэрогелей (способы получения, свойства), масштабированием процесса сверхкритической сушки (существующие установки и промышленные производства).

Был проведен системный анализ существующих методов моделирования процессов в среде сверхкритических флюидов, по итогам которого можно сделать вывод о целесообразности использования различных математических моделей на нано- микро- и макроуровнях процесса. Так, при изучении процесса на малых масштабах наилучший результат даст использование клеточно-автоматных моделей, а на больших – применение моделей, основанных на положениях механики сплошных сред.

Показано, что предварительные экспериментальные исследования должны быть сосредоточены на изучении структур получаемых органических и гибридных аэрогелей, а также на изучении кинетики процесса сверхкритической сушки.

Теоретически исследованы двухкомпонентные системы в сверхкритическом состоянии, а также процессы тепло- и массопереноса, протекающие в ходе сверхкритической сушки. Изучено фазовое равновесие двухкомпонентных систем диоксида углерода – полярный органический растворитель при параметрах, соответствующих ходу процесса сверхкритической сушки. Выбраны наиболее подходящие уравнения для описания свойств двухкомпонентных систем в сверхкритическом состоянии: плотности, вязкости, теплоемкости, теплопроводности, коэффициента диффузии. Полученные данные будут использованы при разработке математической модели сверхкритической сушки, для расчета начальных условий. Кроме того, они могут быть использованы при выдаче рекомендаций для осуществления масштабного перехода.

Выбраны наиболее подходящие модели для описания внутренней структуры изучаемых аэрогелей. Разработана клеточно-автоматной модели генерации структур аэрогелей.

Разработано ЭО ПО «Aerogen Structure» для генерации компьютерных трехмерных структур аэрогелей различными методами. Для него были разработаны и реализованы алгоритм расчета удельной площади поверхности и графический пользовательский интерфейс. С использованием созданного ЭО ПО была проведена пробная генерация трёхмерных структур аэрогелей с варьированием методов генерации структур, размера генерируемой структуры и радиуса единичного структурного элемента. Для всех сгенерированных структур была рассчитана удельная площадь поверхности.

Построены виртуальные геометрии реакторов объемом 5 л, 30 л и 500 л с варьированием некоторых конструктивных особенностей. В рамках каждой геометрии с использованием различных методов построены расчетные сетки, среди которых выбраны наиболее подходящие. На примере расчета уравнений модели гидродинамики движения чистого диоксида углерода проведена адаптация полученных расчетных сеток, в ходе которой подтверждена точность получаемого расчета.

Разработана клеточно-автоматная модель для генерации структур аэрогелей, которая отличается тем, что подходит для предсказания структуры аэрогелей различной природы. На ее основе создано ЭО ПО, которое является авторской разработкой и не имеет точных аналогов в мире. Предложены виртуальные геометрии реакторов различного объема для проведения процесса сверхкритической сушки. Исходя из результатов анализа научно-технической литературы и патентного поиска геометрии реактора объемом 500 л не имеют аналогов и после проведения последующих исследований наилучший вариант реактора данного объема может быть предложен для создания полупромышленного производства.

Работы по этапу 1 выполнены в соответствии с планом-графиком исполнения обязательств, а полученные результаты соответствуют требованиям к выполняемому проекту. Полученные результаты соответствуют мировому уровню работ в данном направлении.

В мире в открытом доступе нет работ связанных с разработкой полупромышленного производства аэрогелей.

3. Охраноспособные результаты интеллектуальной деятельности (РИД), полученные в рамках прикладного научного исследования и экспериментальной разработки

На первом этапе выполнения работ охраняемые результаты интеллектуальной деятельности не разрабатывались

4. Назначение и область применения результатов проекта

Разрабатываемые математические модели, компьютерные программы и прочие результаты этапа предназначены для создания математических моделей и масштабирования процесса получения аэрогелей, а также для создания электронной модели установки и временного (пускового) технологического регламента первого опытного полупромышленного производства нового поколения многофункциональных нанопористых органических и гибридных аэрогелей в форме сферических микрочастиц. Такие материалы могут быть использованы в качестве адсорбентов токсичных промышленных газов, для контроля параметров микроклимата в замкнутых помещениях, при производстве товаров народного потребления и в пищевой промышленности

Внедрение результатов работ позволит значительно упростить процесс создания промышленного производства аэрогелей различной природы.

Полученные на первом этапе выполнения работ результаты будут использованы на последующих этапах для разработки математической модели сверхкритической сушки и при масштабировании данного процесса. Полученные таким образом результаты будут использованы как российскими участниками проекта, так и иностранным партнером, для повышения эффективности процесса сверхкритической сушки на существующем оборудовании и при разработке нового оборудования, особенно промышленного масштаба.

5. Эффекты от внедрения результатов проекта

Внедрение результатов работ позволит создать промышленное производство аэрогелей различной природы, обладающее максимально возможной эффективностью. С использованием такого промышленного производства появится возможность получать аэрогели со стоимостью ниже среднерыночной. Такое экономическое преимущество откроет новые перспективы для их применения в самых разнообразных отраслях промышленности и сферах человеческой деятельности, в том числе для применения в качестве адсорбентов токсичных промышленных газов, для контроля параметров микроклимата в замкнутых помещениях, при производстве товаров народного потребления и в пищевой промышленности.

Результаты, полученные в ходе выполнения предлагаемого проекта, будут являться заделом для проведения опытно-конструкторских НИР, направленных на разработку пусковых и производственных регламентов.

6. Формы и объемы коммерциализации результатов проекта

Проект находится на начальной стадии разработки и на текущий момент не имеется результатов достаточной для коммерциализации степени проработки.

Промышленное производство аэрогелей ограничено и включает лишь производство данных материалов на основе диоксида кремния. Только компания BASF Lemfoerde произвела запуск первого пилотного производства органических аэрогелей на основе полиуретана под торговой маркой Slentite. Результаты проекта позволят ускорить создание и значительно снизить стоимость процесса промышленного производства аэрогелей различной природы в виде частиц. Такое производство позволит значительно расширить рынок сбыта аэрогелей, сделать их конкурентоспособным продуктом.

7. Наличие соисполнителей

Соисполнитель ООО «МИП «Новые решения» привлекался на первом этапе реализации ПНИ (2016 год).

федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева"

И.О. ректора

(должность)



Руководитель работ по проекту

руководитель МУНЦ

(должность)

(подпись)

Юртов Е.В.

(фамилия, имя, отчество)

(подпись)

Меньшутина Н.В.

(фамилия, имя, отчество)