

## КРАТКАЯ АННОТАЦИЯ РАБОТЫ

### «Дизайн высокотемпературных регенерируемых сорбентов CO<sub>2</sub>»

*Владимир Сергеевич Деревщи́ков, Виктория Сергеевна Семейкина,  
Евгений Геннадьевич Малькович*

#### *Введение*

В условиях роста потребления ископаемых топлив и обеспокоенности мирового сообщества растущими выбросами парниковых газов (CO<sub>2</sub>) приоритетным направлением развития энергетики является рациональное использование энергоресурсов и развитие технологий, направленных на ограничение эмиссии углекислого газа. На сегодняшний день регенерируемые сорбенты CO<sub>2</sub> на основе оксида кальция рассматриваются в качестве перспективных материалов для связывания диоксида углерода в процессах очистки дымовых газов электростанций, ТЭЦ и процессах газификации биомассы с целью получения водорода для топливных элементов [1].

Основной проблемой использования сорбентов CO<sub>2</sub> является уменьшение их сорбционной емкости в циклах сорбция/регенерация, происходящее в первую очередь вследствие спекания. Известно, что текстурные свойства поглотителей существенно влияют как на величину, так и на стабильность сорбционной емкости в циклах сорбции регенерации [2]. Для получения образцов сорбентов на основе CaO с различной пористой структурой используют ряд методов приготовления: прямое термическое разложение природных известняков, Ca-содержащих солей и гидроксидов, «мокрые» методики, в которых осаждаются частицы предшественника определенных размеров и форм, золь-гель метод, гидролиз алкоксидов кальция и пламенный пиролиз. В указанных способах текстура поглотителя регулируется в основном химической природой предшественников и условиями синтеза [3].

В последние два десятилетия активное развитие получил подход к синтезу керамических материалов и катализаторов, в котором в образец для порообразования вводится темплат с заданными формой и размером частиц. После формирования и отверждения гранул частицы темплата удаляются, в результате чего образец приобретает требуемую пористую структуру, с заданным размером и объемом пор [4].

Мы полагаем, что темплатный подход позволит создать сорбенты CO<sub>2</sub> с оптимальной пористой структурой, способной обеспечить высокие эксплуатационные характеристики.

В целях оптимизации пористой структуры будет использовано математическое моделирование, основанное на методах вычислительной топологии [5].

### *Цель работы*

Основной целью работы является целенаправленный синтез новых высокотемпературных сорбентов  $\text{CO}_2$ , обладающих высокой и стабильной сорбционной емкостью, и механической прочностью. В рамках работы планируется исследовать перспективы темплатного метода синтеза для приготовления сорбентов и др. пористых материалов и проверить применимость современных методов моделирования для расчета сорбционных свойств поглотителей.

### *Основные задачи*

1. Приготовить сорбенты из чистого  $\text{CaO}$  с использованием темплатного подхода, исследовать их морфологические и сорбционные свойства.
2. На базе экспериментальных данных построить адекватную математическую модель процессов сорбции – регенерации в пористой среде, используя алгоритмы плотных упаковок шаров. Провести подсчет геометрических и топологических характеристик среды и найти оптимальные параметры каркаса сорбента на базе модели.
3. С использованием данных математического моделирования провести синтез массивных и нанесенных на инертные носители сорбентов, пористая структура которых сформирована темплатным способом.
4. Изучить влияние размеров и формы темплатов на сорбционные свойства сорбентов.

### *Предполагаемые подходы к решению задач (этапы исследований)*

1. Провести синтез начальной партии массивных хемосорбентов диоксида углерода, и подробно изучить их текстурные и сорбционные свойства (Ртутная порометрия, СЭМ, ТГА).
2. Написать в математических пакетах программу, симулирующую пористую среду, составленную из плотно упакованных шаров малого радиуса (им соответствуют зерна  $\text{CaO}$ ) и шаров большого радиуса (им соответствуют выжигаемые шарики полистирола). Процесс сорбции  $\text{CO}_2$  будет моделироваться как увеличение радиусов малых шаров. По построенной модели можно будет оценить характеристики пористой среды, ее пористость, проницаемость, а также подобрать наиболее оптимальные параметры (радиус полистирольных шариков, их массовая доля) для создания наиболее эффективно работающей структуры.
3. Синтезировать новые массивные и нанесенные сорбенты  $\text{CO}_2$  с использованием темплатных агентов разной размеров и формы, и матриц-инертных носителей различной химической природы. Для формирования пористой структуры будет использован темплатный подход, оптимальный размер и содержание темплатного агента в образцах будет определяться с использованием данных математического моделирования.

*Имеющийся научный задел; экспериментальное оборудование*

Сотрудниками группы адсорбционно-каталитических процессов для топливных элементов накоплен опыт синтеза массивных и нанесенных сорбентов на основе оксида кальция [6]. Существует приборная база для проведения скрининга и модельных испытаний сорбентов (установка термогравиметрического анализа).

Сотрудники группы темплатного синтеза владеют методиками по приготовлению полимерных темплатов с заданным распределением частиц по размеру, в группе разработаны методики приготовления катализаторов с использованием темплатной технологии [7].

Сотрудники лаборатории римановой геометрии и топологии Института математики СО РАН имеют опыт в моделировании и анализе нефтяных пластов и подсчете их топологических характеристик [8]. Для построения математической модели и проведения численных экспериментов планируется использовать вычислительные мощности ИМ СО РАН.

*Использованная литература*

- [1] J. Wang, V. Manovic, Y. Wu, E.J. Anthony, CaO-based sorbents for capturing CO<sub>2</sub> in clean energy processes, Chem. Eng. Trans. 21 (2010) 643–648. doi:10.3303/CET1021108.
- [2] D. Alvarez, J.C. Abanades, Pore-size and shape effects on the recarbonation performance of calcium oxide submitted to repeated calcination/recarbonation cycles, Energy and Fuels. 19 (2005) 270–278. doi:10.1021/ef049864m.
- [3] C. Luo, Y. Zheng, Y. Xu, N. Ding, Q. Shen, C. Zheng, Wet mixing combustion synthesis of CaO-based sorbents for high temperature cyclic CO<sub>2</sub> capture, Chem. Eng. J. 267 (2015) 111–116. doi:10.1016/j.cej.2015.01.005.
- [4] Brian T. Holland, Christopher F. Blanford, Andreas Stein Synthesis of Macroporous Minerals with Highly Ordered Three-Dimensional Arrays of Spheroidal Voids. Science 24 July 1998: Vol. 281 no. 5376 538-540.
- [5] Daniela M. Ushizima, Dmitriy Morozov, Gunther H. Weber, Andrea G. C. Bianchi, James A. Sethian, E. Wes Bethel, Augmented Topological Descriptors of Pore Networks for Material Science IEEE Trans. Vis. Comput. Graph. (2012):Vol. 18(12) pp. 2041-2050.
- [6] V.S. Derevschikov, A. I. Lysikov, A.G. Okunev, High Temperature CaO/Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Carbon Dioxide Absorbent With Enhanced Stability For Sorption-Enhanced Reforming Applications, Ind. Eng. Chem. Res. (2011): Vol. 50(22) pp. 12741-12749.
- [7] K. A. Sashkina, V.S. Labko, N. A. Rudina, V.N. Parmon, E. V. Parkhomchuk, Hierarchical zeolite FeZSM-5 as a heterogeneous Fenton-type catalyst, J. Catal. 299 (2013) 44–52. doi:10.1016/j.jcat.2012.11.028.
- [8] Ya.V. Bazaikin, V.A. Baikov, I.A. Taimanov, A.A. Yakovlev, Numerical analysis of topological characteristics of three-dimensional geological models of oil and gas fields, <http://arxiv.org/abs/1302.6885>