

Н.Р. Букейханов, М. Ауелханкызы, З.А. Мансуров

# Некоторые проблемы конструирования и управления химическими процессами

Алматы  
«Қазақ университеті»  
2015

УДК

*Рекомендовано к изданию Ученым советом  
химии и химической технологии факультета и  
РИСО КазНУ им. аль-Фараби*

**Рецензенты:**

доктор химических наук, профессор **Г.А. Мун**  
(*Казахский национальный университет им. аль-Фараби (г. Алматы)*)

**Н.Р. Букейханов, М. Ауелханкызы, З.А. Мансуров**

Некоторые проблемы конструирования и управления химическими процессами / Н.Р. Букейханов, М. Ауелханкызы, З.А. Мансуров, – Алматы: Қазақ университеті, 2015. – 257 с.

**ISBN**

Авторы данной монографии использовали в основном общие и частные подходы к решению определенного круга синтетических задач, связанных с областью своих научных интересов. В первой части значительное внимание уделено каталитическим процессам, что обусловлено их приоритетной ролью среди промышленных производств важнейших реагентов, материалов и источников энергии.

Во второй части монографии систематически излагается современное исследование наноматериалов. Обобщены экспериментальные результаты по синтезу сажи, фуллеренов, углеродных нанотрубок, графенов и наночастиц оксидов металлов в пламени. На основе представленных экспериментальных данных по синтезу сажи, фуллеренов и графенов в пламени предложена модифицированная схема сажеобразования для богатых топлив, а именно внесена координата давления, которая учитывает образование фуллеренов при низких давлениях, а сажи при высоких давлениях. Кроме того, внесены в схему графены как промежуточное звено образования ПЦАУ и сажи.

Монография может быть полезна и интересна для широкого круга специалистов в области химической физики, нанотехнологии и материаловедения, а также бакалаврам, магистрантам и Ph.D-докторантам.

**УДК**  
**ББК**

ISBN

© Н.Р. Букейханов, М. Ауелханкызы, З.А. Мансуров 2015  
© КазНУ им. аль-Фараби, 2015

## ОГЛАВЛЕНИЕ

	Предисловие	7
	Часть 1 ОБЩИЕ И ЧАСТНЫЕ ПРИНЦИПЫ СОЗДАНИЯ И УПРАВЛЕНИЯ ХИМИЧЕСКИМИ РЕАКЦИЯМИ И ПРОЦЕССАМИ	12
	Глава 1. Принципы создания и управления химическими реакциями и процессами	12
1.1	Принципы планирования органического синтеза	13
1.2	Методы конструирования и управления химическими процессами	16
1.3	Примеры конструирования многокомпонентных каталитических процессов	17
1.4	Технологические приемы повышения эффективности каталитических реакций	27
1.5	Аппаратурное оформление как основа реализации эффективных промышленных производств	32
1.6	Конструирование процессов с высокотоксичными реагентами или продуктами реакции	39
1.7	Нанотехнологии и прогресс химических технологий	42
1.8	Физические факторы и химические процессы	45
1.9	Информационные технологии, автоматизация и химические технологии	57
	ЛИТЕРАТУРА	65
	Часть 2. САЖЕОБРАЗУЮЩИЕ ПЛАМЕНА КАК ХИМИЧЕСКИЕ РЕАКТОРЫ	69
	Глава 1. Низкотемпературное сажеобразование	69
1.1	Феноменология низкотемпературного сажеобразования	71
1.2	Структура фронта сажеобразующих пламен	76
1.2.1	Высокотемпературные пламена	77
1.2.2	Низкотемпературные пламена	78
1.2.3	Эволюция сажеобразования при низкотемпературном горении пропана	82
1.3	Низкотемпературная сажа, образованная в пламени метана и пропана	84
1.3.1	Физико-химические характеристики	84
1.3.2	Образование ультрадисперсной сажи при горении метана в электрическом поле	88
1.4	Исследование экстрактов низкотемпературных саж	93
1.4.1	Выделение и идентификация ПЦАУ образуемых в пламени метана	93
1.4.2	Образование ПЦАУ при низкотемпературном горении пропана	98

1.5	Механизм сажеобразования при низкотемпературном горении метана и пропана	101
1.6	Оптимизация выхода сажи на основе критериальной обработки результатов	106
1.7	Управление образованием ПЦАУ и сажи в режиме горения	110
1.7.1	Влияние химических добавок на образование полициклических ароматических углеводородов	110
1.7.2	Влияние электрического поля	113
	ЛИТЕРАТУРА	118
	Глава 2. Фуллерены и их образование в режиме горения	123
2.1	Фуллерены и их образование в режиме горения	123
2.2	Образование фуллеренов при горении бензол-кислород-аргонной смеси при низком давлении в электрическом поле	128
	ЛИТЕРАТУРА	134
	Глава 3. Углеродные нанотрубки и их образование в режиме горения	137
3.1	Электронно-микроскопическое исследование углеродных нанотрубок полученных в противоточном пламени	140
3.2	Определение выхода УНТ и разработка методики извлечения их из массы образца	145
3.2.1	Извлечение УНТ из массы образца методом экстракции из раствора	145
3.2.2	Извлечение УНТ из массы образца методом окисления	146
3.3	Исследование экстрактов сажи методом ИК-спектроскопии	147
3.4	Синтез углеродных нанотрубок на каталитических подложках	149
	ЛИТЕРАТУРА	155
	Глава 4. Графены и их образование в режиме горения	157
4.1	История графена	157
4.2	Методы получения графена	159
4.2.1	Микромеханическое расслоение графита	159
4.2.2	Жидкофазное расслоение графита	160
4.2.3	Окисление графита	161
4.2.4	Синтез графена методом химического осаждения паров	164
4.2.5	Получение графена в электрической дуге	167
4.2.6	Термическое разложение карбида кремния	169
4.2.7	Эпитаксиальное выращивание графена на металлической поверхности	171

4.3	Идентификация графена	172
4.3.1	Раман-спектроскопия графена	172
4.3.2	Визуальное наблюдение графена	174
4.3.3	Электронно-микроскопическое исследование графена	176
4.4	Синтез слоев графена в пламени	178
4.4.1	Синтез слоев графена в двойном пламени	178
4.4.2	Синтез слоев графена в в диффузионном обратном пламени	180
4.4.3	Синтез графеновых пленок в пламени при атмосферном давлении	184
4.4.4	Синтез в пламени графеновых слоев при низком давлении	190
	ЛИТЕРАТУРА	197
	Глава 5. Синтез в пламени наночастиц оксидов металлов и их использование для повышения эффективности солнечных элементов	201
5.1	Диффузионные горелки	201
5.1.1	Синтез наностержней и наночастиц оксидов металлов в пламени	204
5.2	Современное состояние и перспективы развития возобновляемых источников энергии	207
5.2.1	Современное состояние и перспективы развития возобновляемых источников энергии в Республике Казахстан	210
5.3	Основные характеристики солнечного элемента и область его применения	216
5.3.1	Принцип работы солнечного элемента и его основные характеристики	216
5.3.2	Использования наночастиц для повышения эффективности солнечных элементов	224
5.4	Установка для экспериментов	226
5.4.1	Установка для синтеза наночастиц оксидов металлов	226
5.4.2	Установка для измерения вольтамперных характеристик солнечного элемента	227
5.4.3	Методика проведения эксперимента	227
5.4.4	Ультразвуковая ванна для приготовления суспензии из наночастиц оксидов металлов и этанола	228
5.5	Физико-химические методы исследования	229
5.5.1	Рентгеноспектральный микроанализ	229
5.5.2	Сканирующий электронный микроскоп	231
5.5.3	EDAX-микроанализ в сканирующем электронном микроскопе	232
5.5.4	Атомно-силовая микроскопия	233
5.6	Образование наночастиц оксидов металлов в	

	диффузионном пропан – кислородном пламени на встречных струях	234
5.6.1	Влияние времени нахождения нихромовой проволоки в пламени	238
5.7	EDAX-микроанализ нихромовой проволоки	244
5.8	Исследование структурных и морфологических свойств наноразмерных частиц оксидов металлов с применением АСМ	246
5.8	Влияние наноразмерных частиц оксидов металлов, синтезированных в диффузионном пропан – кислородном пламени на повышении эффективности солнечных элементов	250
	ЛИТЕРАТУРА	253

## ПРЕДИСЛОВИЕ

В 1994 году была опубликована монография Н.Р. Букейханов, З.А. Мансуров, Ю.А. Моисеев «Конструирование и управление химическими процессами» (Алматы, 1994). В первой главе рассмотрены «Общие и частные принципы создания и управления химическими реакциями и процессами», глава была написана д.х.н., проф., Букейхановым Н.Р. Вторая глава посвящена новым технологиям на базе процесса каталитического крекинга углеводородов (к.х.н. Моисеев Ю.А.) В третьей главе «Сажеобразующие пламени как химические реакторы» написанной д.х.н., проф. Мансуровым З.А. приведены результаты по синтезу наноуглеродных материалов в режиме горения.

Предлагаемая вниманию читателей новая монография – Н.Р. Букейханов, М. Ауелханкызы, З.А. Мансуров «Конструирование и управление химическими процессами», - отличается от предыдущий монографии. Она полностью обновлена, вдвое больше по объему текста и числу рисунков. В ней также появились новые главы, посвященные углеродным нанотрубкам, новому материалу – графену, и синтезу наночастиц оксидов металлов. Нужно также отметить, что монография содержит гораздо более богатую и современную библиографию.

Химический процесс включает в себя как собственно превращения веществ с образованием новых соединений, определяемое их природой, концентрацией, воздействием катализаторов, инициаторов, температуры, давления, других физических факторов, так и технологические стадии дозирования исходных веществ, выделения и очистки продуктов реакции, реализуемые в определенной аппаратуре. Поэтому эффективность процесса зависит от качества управления материальными, энергетическими, информационными потоками и оценивается не только по выходу целевых продуктов, но и по объему энергетических и материальных затрат (в рамках данной работы не рассматриваются социально-экономические показатели эффективности химических процессов).

Методология разработки процессов сочетает использование положений современных теорий химических реакций и инженерных методов, которые включают группу методов технического творчества (в настоящее время известно более 100 эвристических методов и их модификаций) и компьютерные методы поискового конструирования, основанные на использовании ЭВМ в решении творческих инженерных задач (в настоящее время известны десятки данных методов). Многие из этих методов и термин «конструирование» используют при разработке и совершенствовании химических процессов. Так, например, один из процессов получения высокопрочных керамических материалов назван «окислительным конструированием». В работах Института катализа СО РАН, сотрудников других академических институтов и ведущих вузов страны, включая докторские диссертации по химии и химическим технологиям, используют терминологию «конструирование катализаторов», «конструирование функций».

Авторы данной книги использовали в основном общие и частные подходы к решению определенного круга синтетических задач, связанные с областью своих научных интересов. При этом значительное внимание уделено каталитическим процессам, что обусловлено их приоритетной ролью среди промышленных производств важнейших реагентов, материалов и источников энергии.

Если в 1985 году было известно около 6-7 миллионов химических соединений, то к концу 20 века - около 18 миллионов веществ, включая вещества, синтезируемые в микроколичествах методами комбинаторной химии. Из них около 96 % - органические соединения, построенные из 6-18 элементов (С, Н, О, S, Р, N и др.). Неорганические соединения построены из всех других элементов, включая типичные элементы органических веществ. Их число приближается к 400 тысячам. Обширную пограничную область представляют элементоорганические соединения и также значительное число катализаторов на основе неорганических соединений.



Необходимо отметить первостепенную роль катализа в создании ряда современных промышленных производств (около 90 %).

Статистически вопросы органического синтеза и катализаторы для него изучают в значительно больших масштабах. Поэтому многие закономерности создания реакций и процессов изучены и разработаны в области органической химии. В тоже время большинство из них имеют общенаучное значение и они используются в области неорганического синтеза.

Прошло более 20 лет, которые характеризуются активным развитием нанотехнологии. Нанотехнология – одно из наиболее активно обсуждаемых направлений научных и технологических исследований, которое приобрело в последние годы грандиозный размах и с которым связаны надежды широкого круга ученых, технологов. Это направление рассматривается как основа новой промышленной революции, которая должна привести к изобилию принципиально новых по своим возможностям изделий. Исходя из своей логической структуры, термин «нанотехнология» должен относиться к технологии производства материалов и изделий, основанной на использовании наноразмерных объектов.

Он был предложен в 1974 г. и определял тогда технологические приемы обработки макроскопических деталей с нанометровыми допусками. И только в 80-е годы прошлого века этому термину было придано совершенно новое содержание. В сущности оно определило в значительно большей степени междисциплинарное научное, а не технологическое, направление, т.е. изучение возможностей использования физических, химических и биологических явлений для создания материалов и устройств, свойства которых определяются их структурой в нанометровом диапазоне. Именно поэтому международный стандарт «Терминология для нанотехнологии», принятый в 2006 г., включает в себя, кроме расплывчато сформулированного термина «нанотехнология», еще и термин «нанонаука».

Прежде всего, нужно отметить, что нанотехнология как самостоятельная область не возникла спонтанно в конце

прошлого века, а явилась продолжением исследований, которые выполнялись на протяжении в основном второй половины прошлого века. И более того, несмотря на то, что первые идеи – «есть еще много места в самом низу», были выдвинуты замечательным физиком Ричардом Фейнманом еще в 1959 г., нанотехнология не вышла, в сущности, из периода «первоначального накопления».

Нанонаука и нанотехнологии включают в себя сложный комплекс взаимосвязанных направлений трёх наук – физики, химии и биологии:



Мультидисциплинарный характер нанонауки и нанотехнологий

Изучение явлений окружающего нас мира на атомно-молекулярном уровне началось еще в начале прошлого века. Оно сопровождалось разработкой новых методов определения структуры вещества. А они, в свою очередь, позволили понять фундаментальное значение белков и ДНК и создать на этой основе новые подходы к производству разнообразных, необходимых в повседневной жизни материалов.

Термин «нанотехнология» обязан своим рождением научно-популярной литературе, его следует воспринимать как ... завлекательный ярлык для привлечения инвестиций и

общественного интереса». Это высказывание принадлежит Дональду Эйглеру – научному сотруднику исследовательского центра IBM США. Такое определение, очевидно, точно отражает сложившееся положение дел в этой сфере.

В настоящее время для получения наноразмерных материалов используется два метода: «сверху вниз» и «снизу вверх». Подход «сверху - вниз» основан на уменьшении размеров физических тел механической или иной обработкой, вплоть до получения объектов с ультрамикроскопическими, нанометровыми параметрами. Идея технологии «снизу - вверх» заключается в том, что сборка создаваемой «конструкции» осуществляется непосредственно из элементов «низшего порядка» (атомов, молекул, структурных фрагментов биологических клеток и т. п.), располагаемых в требуемом порядке. Этот подход можно считать «обратным» по отношению к привычному методу миниатюризации «сверху - вниз», когда мы просто уменьшаем размеры деталей.

В Институте проблем горения достигнуты значительные успехи в области синтеза и использования наноматериалов. В последнее время опубликованы монографии и учебные пособия: «З.А. Мансуров, Н.Г. Приходько, А.В. Савельев. Образование ПЩАУ, фуллеренов, углеродных, нанотрубок и сажи // Алматы: Казак университеті, 2012», «З.А. Мансуров, Т.А. Шабанова, Н.Н. Мофа. Синтез и технологии наноструктурированных материалов // Алматы: Казак университеті, 2012» и «Z.A. Mansurov. Soot formation: textbook // Almaty: Kazakh University, 2012», которые получили положительные отзывы научного сообщества. Во-второй части данной монографии в сжатой форме приведены основные результаты указанных исследований.

Монография будет полезна и интересна для широкого круга специалистов в области химической физики, нанотехнологии и материаловедения.