

reinigung.pdf (18.02.2014).

2. Martens S., Eggers B., Evertz T. Untersuchung des Einsatzes von Nanomaterialien im Umweltschutz, doi: [http://www.umweltbundesamt.de/sites/default/files/medien/461/publikationen/3778\\_0.pdf](http://www.umweltbundesamt.de/sites/default/files/medien/461/publikationen/3778_0.pdf) (18.02.2014).

3. L. Jochen., G. Ott. Landesanstalt für Umwelt, Messungen und Naturschutz Baden-Württemberg, Nanomaterialien: anwendungen im Umweltbereich, doi [http://www.lubw.baden-wuerttemberg.de/servlet/is/74003/nanomaterialien\\_anwendungen\\_umweltbereich.pdf?command=downloadContent&filename=nanomaterialien\\_anwendungen\\_umweltbereich.pdf](http://www.lubw.baden-wuerttemberg.de/servlet/is/74003/nanomaterialien_anwendungen_umweltbereich.pdf?command=downloadContent&filename=nanomaterialien_anwendungen_umweltbereich.pdf) - (18.02.2014).

4. Photokatalytische Wasser-Reinigung-Modul, doi: <http://www.findpatent.ru/patent/239/2394772.html> (18.02.2014).

## МОДЕЛИРОВАНИЕ МИКРОСТРУКТУРЫ ЦЕОЛИТА ПЛОТНО УПАКОВАННЫМИ СФЕРОПОЛИЭДРАМИ

М.А. Белобородов, Е.В. Дробков

Научный руководитель: к.ф.-м.н. Двилис Э.С.

Национальный исследовательский Томский политехнический университет

Россия, г.Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: [saimonor@mail.ru](mailto:saimonor@mail.ru)

## MODELLING OF MICROSTRUCTURE USING DENSE PACKING OF SPHERE-POLYHEDRA

M.A Beloborodov, E.V. Drobkov

Scientific Supervisor: Dr. E.S. Dvilis

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: [saimonor@mail.ru](mailto:saimonor@mail.ru)

*The paper presents an optimization approach to modelling of microstructure using dense packing of sphere-polyhedra. Methods have been validated on examples of zeolite particles. Presented new regression model of quality. Actual application of proposed method is 3D reconstruction of zeolite powders microstructure. Presented results suggest to prolongation of investigations.*

В последнее время эффективность и экономичность процессов нефтепереработки и нефтехимии приобретает первостепенное значение. Для получения ценных химических продуктов нефтехимии наиболее перспективными являются процессы на основе цеолитсодержащих катализаторов. Цеолиты для этих нужд должны обладать развитой удельной поверхностью, иметь большой адсорбционный объем пор и открытую пористость. Указанные параметры достигаются на стадии производства цеолитов, а частные морфологические особенности полученных порошков (формы и размер частиц), хоть и отличаются большим разнообразием, но могут быть предсказаны и в некотором диапазоне задаются режимами синтеза. Вместе с тем, разнообразие структурных и морфологических характеристик заставляют для каждого порошкового материала и режима его получения определять важные морфологические характеристики и сопоставлять их с эксплуатационными требованиями, что несколько затрудняет и усложняет оптимизационные исследования по поиску наиболее приемлемых режимов синтеза и составов цеолитов.

Цеолиты обладают уникальными свойствами. Это микропористые кристаллические вещества. Кристалличность обеспечивает механическую и химическую стабильность цеолитов, одинаковый и контролируемый размер пор, каналов, полостей. Это свойство определяет использование цеолитов в качестве молекулярных сит, адсорбентов, детергентов. Широко варьируемый химический состав цеолитов позволяет модифицировать физико-химические свойства материалов в заданном направлении. Размер цеолитных полостей не превышает 2 нм. Физико-химические, химические свойства веществ могут существенно меняться при нахождении в условиях конфинмента – заключении молекул вещества в порах, сопоставимых по размеру с размером самих молекул. Структурный каркас цеолита со специфическим расположением дефектов и активных химических центров может служить матрицей для проведения направленных химических реакций. Цеолиты все чаще используют в качестве катализаторов. Крекинг нефти в цеолитах определяет одно из важнейших промышленных применений цеолитов. Наноразмеры полостей, возможность упорядоченного расположения активных центров, селективность и направленность воздействия на химические группы молекул делают цеолиты не только инструментом нанотехнологий, но их объектом [1].

Основной проблемой моделирования порошковых микроструктур с помощью плотной упаковки эквивалентными частицами является неполное соответствие их формы. Наличие одних лишь исчерпывающих данных о гранулометрическом составе в качестве наиболее точного входного параметра модели приводит к необходимости её последующей калибровки весовыми коэффициентами для зависимых от формы частиц параметров. Форма частиц реального порошка, как правило, идеализируется в модели простейшими телами (обычно, сферами).

Актуальным приложением подобных задач моделирования является исследование порошковых объектов, морфология частиц которых существенно определяет их эксплуатационные свойства. Таковыми, например, являются цеолиты, которые стали наиболее перспективными для получения ценных химических продуктов нефтехимии в процессах на основе цеолитсодержащих катализаторов [2, 3]. Цеолиты для этих нужд должны обладать развитой удельной поверхностью, иметь большой адсорбционный объем пор и открытую пористость. Учитывая технические, организационные и финансовые сложности, связанные с этими технологиями, актуально развитие альтернативных способов исследования влияния микроструктуры цеолита на его адсорбционные свойства при условии минимизации затрат на проведение натуральных экспериментов. 3D-реконструкция микроструктуры, учитывающая не только гранулометрический состав порошка, но и форму его частиц, помогла бы решить задачу минимизации затрат на исследования и оптимизацию.

Благоприятной для поставленной задачи особенностью цеолитов является то, что при большом разнообразии форм их частиц они обнаруживают склонность к образованию геометрически правильных классов тел (призмы с различным соотношением размеров и правильными основаниями). Эта особенность позволяет моделировать такие сложные структуры несколькими классами сферополиэдров, исключив при этом присущую методам моделирования проблему вынужденной идеализации формы частиц. Для таких моделей появляется возможность не только заложить точные данные о гранулометрическом составе, но и сохранить сложную морфологию структуры и точно определить параметр её удельной поверхности, который в последующем может быть с высокой достоверностью сопоставлен экспериментально измеренной величине удельной поверхности реального порошка [4]. Последующая адаптация модели путём

изменения соотношения размеров полиэдров при сохранении гранулометрического состава и удельной поверхности обеспечит её полное соответствие реальному объекту.

В работе использован описанный адаптационный подход к моделированию морфологически сложных многофракционных микроструктур с помощью плотной упаковки сферополиэдров (рис. 1). Решены частные задачи поиска адаптированной модели частиц заданного гранулометрического состава. Проведена проверка адекватности расчётных морфологических свойств модели на примере реальных порошков цеолита, для которых определяли гранулометрический состав методом лазерной дифракции, и форму частиц их различных классов методом электронной микроскопии. Моделирование цеолита проводили с применением виртуального вычислительного комплекса "nanoModel 3.0". Для построенных моделей были получены расчётные данные о их удельной поверхности, которые сопоставлялись с результатами прямых измерений удельной поверхности реальных порошков методом Брунауэра-Эммета-Теллера.

Полученные результаты моделирования показали хорошее совпадение с экспериментом и дают основания для продолжения исследований в выбранном направлении для цеолитов других типов. Конечной целью является разработка методики построения моделей микроструктуры цеолитсодержащих катализаторов, которая позволит частично заменить натурные исследования имитационными экспериментами, сократив тем самым затраты на разработку процессов получения ценных химических продуктов нефтехимии.

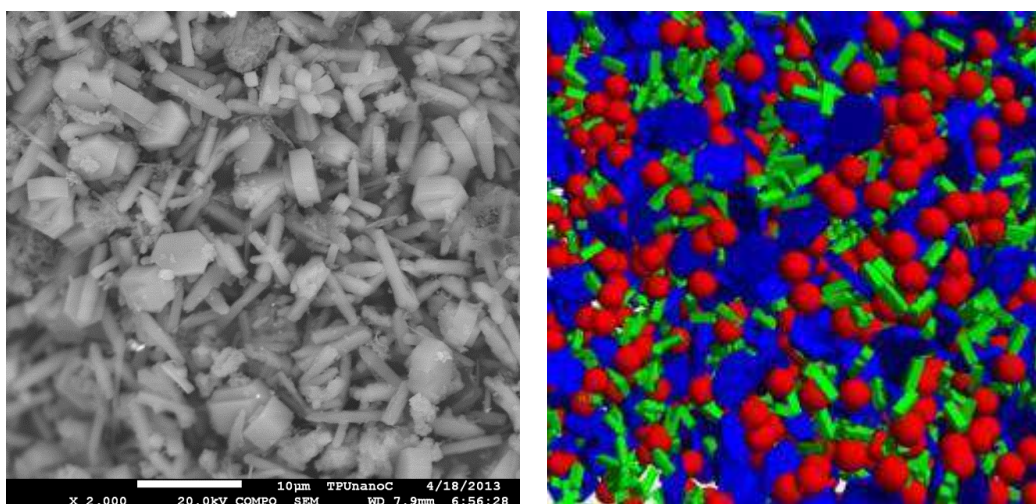


Рис. 1. Сопоставление модели цеолита с реальным порошком:  
а) SEM изображение порошка цеолита; б) модель упаковки различных классов сферополиэдров (обозначены разными цветами), имитирующих структуру порошка цеолита

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бушуев, Ю. Г. Цеолиты. Компьютерное моделирование цеолитных материалов; Иван. гос. хим.-технол. ун-т. – Иваново, 2011. – 104 с
2. Пат. 1527154, РФ, МПК С 01 В 33/28. Способ получения высококремнеземного цеолита ZSM-5 // Ерофеев В.И., Антонова Н.В., Рябов Ю.В., Коробицина Л.Л. – №4329130/31-26. Заявлено. 17.11.1987; Оpubл. 07.12.1989.
3. Пат. 2313488, РФ, МПК С 01 В 39/48. Синтетический цеолит и способ его получения // Ерофеев В.И., Коваль Л.М. – Заявлено. 24.04.2006; Оpubл. 27.12.2007.
4. Martin A., Nowak S., Wiecker W. Appl; Catal, 1990. – V. 57. – P. 203.