

А В Т О Р С К А С П Р А В КА
за научните и научно-приложни приноси на трудовете
на гл. ас. д-р инж. Адриана Асенова Георгиева

представени за участие в конкурсе за заемане на академична длъжност „доцент“ в област на висше образование 5. Технически науки, професионално направление 5.10 Химични технологии, научна специалност 02.10.09 „Процеси и апарати в химичната и биохимичната технология“ (ДВ, бр./03.05.2019 г.) в Университет „Проф. д-р Асен Златаров“ - Бургас.

Научната продукция на гл. ас. д-р инж. Адриана Асенова Георгиева е в съответствие с областта на висшето образование, професионалното направление - Химични технологии и научната специалност - Процеси и апарати в химичната и биохимичната технология по обявения конкурс. Публикациите са в български и чуждестранни научни списания - реферирани научни издания, сборници със сигнатура, с научен редактор и издателство, като са съобразени с националната и университетската образователно-нормативна база за придобиване на научни степени и за заемане на академични длъжности.

Приложени са документи за научно-преподавателската работа на кандидата в Университета: научно-преподавателски стаж - 12 години (асистент, главен асистент); разработени 6 учебни програми (ОКС „Бакалавър“ - 5; ОКС „Магистър“ - 1); участие в 18 научно-изследователски проекта (1 - международен; 5 - национални; 12 към научно-изследователския сектор при Университета) по теми, разработвани с колеги (на един от проектите е Ръководител) и 1 национален-образователен проект; участие в организационно-методическото осигуряване, оборудване и функциониране на учебна лаборатория по „Мисообменни процеси“ (№220 Неорганичен кориус); участие в 20 международни научни конференции; издадена монография - 1; общ брой 28 международни научни публикации - 46 (29 на чужди език, 17 на български, в 28 от тях е първи или самостоятелен автор).

Кандидатът е рецензент на публикации в следните реферирани и индексирани научни издания: *Journal of Nanoparticle Research* (ISSN 13880764, 1572896X, Q2, SJR 0.48); *The International Journal of Science & Technology* (ISSN 2049-7318); *Basic Research Journal of Medicine and Clinical Sciences* (ISSN 2315-6864, ISI, IF 0.836, InfoBase IF: 2.87); *Journal of Microbiology Research and Reviews* (ISSN: 2350-1510); *International Invention journal of Medicine and Medical Sciences* (ISSN 2408-7246) и други.

Гл. ас. д-р инж. Адриана Асенова Георгиева е член на: „Съюз на химичните в България“, „Европейска асоциация за химически и молекулни науки“, „Българско дружество по инженерна химия“, „Федерация на научно-техническите съюзи“.

Авторската справка за научните приноси е върху научните трудове, представени за настоящия конкурс за „доцент“ - 1 монография и 31 научни публикации (Приложение №1) (публикациите, включени в дисертацията за присъждане на ОНС „доктор“ и свързаните с тях научни приноси, не са представени). От представените научни трудове 18 са на чужд език, в 19 от тях е първи автор. Шест от тях са в реферирани и индексирани международни научни издания с IF или с Q (Q2, Q3) и SJR. За участие в конкурса са представени 29 цитата и 6 рецензии (Приложение №2).

Научните трудове, съгласно *Списък на научни издания, реферирани и индексирани в световноизвестни бази данни с научна информация и Националният референтен списък на съвременни български научни издания с научно рецензиране към НАГИД*, са разделени в следните две категории:

А. Научни публикации в международни научни издания, реферирани и индексирани в световноизвестни бази данни с научна информация (1a+6a);

В. Научни публикации в съвременни български научни издания с научно рецензиране или в редактирани колективни томове (1b; 25b).

Приносите на гл. ас. д-р инж. Адриана Асенова Георгиева имат научен и научно-приложен характер и са групирани в пет тематични направления в областта на Химичните технологии:

1. Изследване на масопренасянето в колонни апарати:
 - Изследване на масопренасянето при тарелкови колонни апарати;
 - Машабен ефект при колонни апарати;
2. Абсорбция на многокомпонентни смеси;
3. Изследване механизма на формиране на наноразмерни структури в микроемулсийни условия посредством методи на експерименталното и компютърно моделиране;
4. Приложение на карбонатни наноструктури в инженерната химия за получаване на композитни системи;
5. Количествена оценка на емисиите от химико-технологичното оборудване в нефтопреработвателните заводи.

1. Изследване на масопренасянето в колонни апарати

• Изследване на масопренасянето при тарелкови колонни апарати

Един от основните проблеми при тарелковите ректификационни апарати са кинетичните изследвания върху масообмена, които се усложняват поради затрудненията: при определянето на обемната междуфазова повърхност, която се образува при диспергиранието на парната фаза в течността върху тарелката; се смесва при движението ѝ върху тарелката; наличие на нечиствания в разделяните смеси.

Междуповърхността е важна характеристика на газо-течностния слой върху тарелката, пряко влияеща върху масопреносния процес. Познаването ѝ позволява от опитно определени обемни коефициенти да се получат „чистите“ кинетични коефициенти и да се анализира ролята на основните фактори, оказващи влияние върху кинетиката на процеса.

Проведени са редица изследвания върху този проблем. Използваната методология има експериментално - изчислителен характер, а получените резултати са принос в тази област. Експерименталните данни са получени на лабораторна моделна тарелкова колона, при изпълнение на следните условия:

- течната фаза се движи в режим на пълно смесвани върху тарелката;
- парната фаза се движи в режим на пълно изместяване (бутален режим);
- колоната работи в режим на пълна флегма при атмосферно налягане;
- в колоната са монтирани синести тарелки с изнесени външни преливици.

Съгласно предложена методика са изчислени специфичната междуфазова повърхност, скоростта на мехурчето, геометричните му размери: диаметър, дължина, височина, обема на отделното мехурче, както и височината на светлата течност. Експериментално са определени количеството (Q_G) и скоростта на парната фаза (n_G) в колоната, както и всички физико-химични параметри (плътност, вискозитет, повърхностно напрежение) за шест различни бинарни смеси: Пропанол-Вода, Метанол-Пропанол, Метанол-Етанол, Метанол-Вода, Етанол-Вода и Дихлоретан-Пропанол [Публикация 3а., 6б. и 7б.].

Влиянието на стойността на повърхностното напрежение и плътността върху специфичната междуфазова повърхност е отразено основно чрез критерия на Вебер. С помощта на метода на най-малките квадрати всички данни са обработени под формата на обобщено критериално уравнение, което описва над 80% от получените резултати с грешка $\pm 25\%$. Стойностите на повърхностното напрежение за целия изследван скоростен интервал, с нарастване на концентрацията на лесно летливия компонент в куба на колоната, не оказват влияние върху специфичната междуфазова повърхност [Публикации 3а., 6б. и 7б.].

Използвани са експериментални данни за анализиране влиянието на повърхностното напрежение (марангони ефект) върху ефективността на разделяне при ректификация за моделните бинарни смеси. Изменението на повърхностното напрежение, респективно M-индекса (стабилизиационен индекс) оказва положително влияние върху отрицателната смес Дихлоретан-Пропанол, като локалната ефективност нараства в интервала от 77% до 93%. По отношение на неутралната смес Метанол-Пропанол изменението на повърхностното напрежение не оказва съществено влияние върху ефективността на разделителния процес [Публикация 2б.].

Получени са експериментални данни за влиянието на скоростта на парите и концентрацията за моделните смеси: Вода-Оцетна киселина, Етанол-Вода и Хексан-Толуол, върху кинетичните коефициенти на масопренасяне и съпротивлението при ректификация. Изведена е зависимостта на общото

съпротивление при процеса за трите моделни смеси ($1/K_{Ob,a}$) от наклона на равновесната линия (m). Определени са частните обемни коефициенти на масопренасяне в парната и течна фази в условията на пълна флегма. Общинят обемен коефициент на масопренасяне се увеличава и за трите смеси с нарастване скоростта на парите. Дефиниран е дела на фазовото съпротивление в парната фаза, като функция от наклона на равновесната линия. Получените резултати доказват, че съпротивлението на масопренасяне при ректификация зависи от природата на разделяната смес и по-конкретно от наклона на равновесната линия. За използваните моделни смеси съпротивлението в парната фаза се изменя от 100 до 10% при изменение на наклона на равновесната линия от 0 до 5 [Публикация 17b].

Изследвано е влиянието на някои физикохимични свойства, като вискозитет, плътност и коефициент на молекулярна дифузия в двете фази, върху локалната ефективност на ректификацията на моделните смеси: Бензен-Хептан, Хептан-Голусен, Метанол-Голусен и Дихлоретан-Пропанол. Увеличаването на плътността, вискозитета и коефициента на дифузия в парната фаза води до повишаване на локалната ефективност E_{loc} [Публикация 20b].

За моделната смес Метанол-Вода, в условия на пълно смесване на течността върху тарелката и при пълно изместяване на парната фаза по височина на двуфазния слой, експериментално са определени (за парната фаза): скоростта на парите в колоната, F -фактора на натоварване, брой преносни единици, обемният коефициент на масопренасяне, както и локалния КПД. За целия изследван концентрационен интервал коефициента на масопренасяне в парна фаза нараства: с нарастване на F -фактора на натоварване по парна фаза, респ. скоростта на парите в колоната; с нарастване височината на паро-течностния слой. Също така общиия обемен коефициент на масопренасяне по парна фаза и специфичната междуфазова повърхност понижават своите стойности с нарастване на стойностите на F -фактора и височината на паро-течностния слой [Публикации 5a и 1b].

Опитно е определен коефициента на обратно смесване на правотокова клапанна тарелка с отбойници по т.н. „стационарен метод“ и получените резултати са сравнени с данни за други типове тарелки. За целта е използвана пилотна инсталация, позволяваща изследване на коефициента на обратно смесване [Публикация 11b].

• **Машабен ефект при колонни апарати**

Проблемите при моделирането на колонни апарати са в резултат на усложненото хидродинамично поведение на потоците в колоната. Решаването на задачата за междуфазния масопренос е невъзможно, защото функцията на скоростта в уравнението на конвекция - дифузия е неизвестна. Практическото значение на този проблем налага използването на средни концентрации по

напречното сечение на колоната в дифузионен тип модели за симулиране на масопреносните процеси в колоните апарати.

В тази връзка е проведено теоретично изследване на влиянието на скоростните профили върху ефективността на процеса и мащабния ефект за колонни апарати [Публикация 14b.]. В моделните колони разпределението на скоростта е практически еднородно, в сравнение с реалните колони, където радиалната неравномерност е резултат от входните конструктивни дефекти на колоната. Разгледано е движението на газ в колона с радиус r_0 през слой от колоната. Разгледано е движението на газ в колона с радиус r_0 през слой от колоната. Разгледано е движението на газ в колона с радиус r_0 през слой от колоната. Анализиран е ефекта на радиалната неравномерност на скоростта върху ефективността на процеса. Ако обемната концентрация на активните центрове на катализаторната повърхност е много голяма, обемната химична реакция от първи порядък е възможна и тя е обемен източник на маса.

Обемната химична реакция и радиалната нееднородност на разпределението на скоростта водят до конвективно и дифузионно масопренасяне, т.е. уравнението на конвекция - дифузия с обемна реакция може да бъде използвано за математическо описание на процеса. Численото симулиране на моделната и индустриална колона, основаващо се на математичен модел и използвайки различни изрази за скоростта, показва ефекта на радиалната неравномерност на скоростта върху ефективността на процеса (Q).

Изследвано е влиянието на мащабния преход върху ефективността на разделяне между две лабораторни ректификационни колони при процеса ректификация на бинарната смес Метанол-Вода, в условия на чиста флегма. За реализирането на проведеното изследване са изработени малко мащабна стъклена лабораторна колона с една ситеста тарелка и лабораторна колона с три ситеста тарелки [Публикация 12b.].

2. Абсорбция на многокомпонентни смеси

За решаването на редица технологически проблеми широко приложение намират процесите абсорбция и хемисорбция. Основателен интерес представляват абсорбенти, явяващи се технологичен отпадък от содово производство. Абсорбцията е химична реакция протича в два етапа: дифузия на газа в течността и химично взаимодействие. При използването на алкални суспензии протича и трети етап - разтваряне на твърдата фаза в суспензията.

При проведеното експериментално изследване е използвана газова смес въздух/SO₂ с концентрация на SO₂ в интервала $1.41\text{--}17.32 \cdot 10^{-3}$ mol/Nm³ и три вида абсорбенти: отидна суспензия от содово производство, филтрат от нея и този приведени в литературата, като порядък им е един и същ ($\beta_t \cdot 10^4$ m/s), което може да се обясни със скоростта на разтваряне. Оценено е влиянието на

химичната реакция за ускоряване на процеса абсорбция на SO_2 при използване на филтрат; на отпадна суспензия: на работни суспензии с различно съдържание на твърда фаза, посредством скоростта на хемисорбция (R) и тази на чиста физическа абсорбция (R_f). Протичащето на химична реакция води до повишаване скоростта на абсорбция на SO_2 в сравнение с тази при физическа абсорбция. Най-висока стойност на теоретичния (E_t) и експерименталния (E) коефициент на ускорение на абсорбцията се наблюдава при работа с отпадна суспензия [Публикация 22b.].

Изследван е процесът на селективна абсорбция на H_2S от въглеводородни газове в нефтопреработвателни компании с воден разтвор на моноетаноламин (MEA) с концентрация най-често около 15 mass%. Оценена е възможността за подмяната на един абсорбент с друг. Недостатък на процеса в повечето случаи е високият разход на абсорбент, който води до увеличаване на количеството на финно дисперсни капки в очищения газ, в резултат на пронеси, като разширение и висока летливост на парите на MEA. В различните абсорбционни инсталации за улавяне на H_2S от въглеводородни газове с MEA, линеват капкоуловители на върха на абсорбционните колони или сценарици апарати извън тях, което води до допълнителни загуби на абсорбент.

За постигането на по-ефективен абсорбционен процес и намаляване загубите на MEA е предложено следното конструктивно технологично решение - поставяне на сепаратор за напускання очищен газ. С помощта на програмата Honeywell (на база входни данни за потоците в първа абсорбционна колона) са изчислени геометричните размери на сепаратора. Предложението сепаратор ще позволи минимизиране разширението на абсорбента и намаляване загубите на моноетаноламин [Публикация 5b.].

3. Изследване механизма на формиране на наноразмерни структури в микроемулсионни условия посредством методи на експерименталното и компютърно моделиране

Съвременният подход при провеждане на научно-изследователската дейност, предполага прилагането на актуални и адекватни математически и статистически методи за натрупване и интерпретиране на експерименталните резултати. В тази насока са проведени следните изследвания:

Изследвана е вода/масло (Water/Oil) микроемулсията, като вид колоидно-дисперсна система, в качеството на алтернативна реакционна среда при получаване на относително монодисперсни малки колоидни частици. От термодинамична гледна точка е описана нейната стабилност, подреждане молекулите на липергента при образуването на т. нар. "обратен мицел". Анализирано е как размерът на водните капки, в зависимост от условията на получена микроемулсия и природата на стабилизатора, може да се изменя в широки граници [Публикация 19b.]. Изследвана е обратната микроемулсионна система (воден разтвор на $\text{Ca}(\text{OH})_2$, рецп. $(\text{Ba}(\text{OH})_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O})/\text{n-хексан}/\text{Аерозол-ОТ}$)

като специален „микрореактор”, позволяващ реализиране на химични реакции и целенасочено регулиране размера на ултрасперсните частици в процеса на самия синтез [Публикации 21b. и 23b.].

За да се работи на квантово ниво е необходима уникална апаратура и видно финансиране на експерименталните изследвания. Затова е необходимо предварително моделиране на тези процеси и предварително симулиране на всички дейности.

За първи път у нас в тази насока са проведени изследвания целящи изясняване механизма на формиране на наноразмерни структури в микроемулсионни условия чрез методите на експериментално и компютърно моделиране [Публикации 3b., 15b., 16b., 24b. и 25b.].

Посредством подходите на експерименталното моделиране е дефинирано влиянието на отделните фактори върху големината, формата и структурата на получените наночастици. В процеса на изследване са използвани: различна концентрация на соли във водната система, различно отношение на обемите на емулсионните среди, скорост на подаване на газа и др. Оценено е, както влиянието на определени фактори (реакционни условия) върху крайния наноразмерен продукт, така и качествено и количествено степента на взаимното им взействие. Полученият модел адекватно описва изследвания процес на формиране на наноразмерни структури в микроемулсионни условия и с подходящ за извършване на оптимизация [Публикации 24b. и 25b.].

Проведеното качествено и количествено охарактеризиране на процеса включва предимно интегрални характеристики на анализирания обект, системно изследване на реакционните условия посредством пълен многофакторен експеримент на две нива [Публикации 24b. и 25b.], както и някои локални оценки по отношение на структурата на нанопродукцията, направени с методите на електронната микроскопия (TEM, SEM) [Публикация 18b.].

На основата на тези резултати е създаден модел описващ най-вероятния механизъм на взаимодействие на компонентите в зависимост от полярността на средата, междуфазовото напрежение на фазовата граница, термодинамичните условия, тъгъла на умокряне и други параметри. С това е създадена връзка между теоретичните зависимости и процесите протичани в една микросреда [Публикация 2a.].

Направен е опит посредством съвременни методи на компютърното моделиране да се изследва формирането на карбонатни наноструктури в микроемулсионни условия. Изследваната моделна система е вода/масло (W/O) микроемулсия със съответните компоненти: $\text{Ca}(\text{OH})_2/n\text{-C}_6\text{H}_{14}/\text{C}_{20}\text{H}_{37}\text{NaO}_7\text{S}$. Разгледани са два случая: анализирано е образуването на една частица в една емулсионна капка [Публикация 3b.] и на няколко частици в една капка за моделната система [Публикация 15b.]. Построени са вероятен механизъм на контакти на реагентите и съществуваща кинетика при формирането на карбонатните наноструктури в микроемулсионни условия. Съставен е

математичен модел за анализ на сложното взаимодействие между различните механизми, като синтез и разпад на емулсионни капчици, протичане на химична реакция, формиране на зародиши и растеж на частици по време на кристализацията в микроемулсионни условия. Резултатите от проведеното изследване качествено потвърждават наблюдаваните в предходни експериментални изследвания промени в размера на наноструктурите.

Получената комбинация от уравнения на масов баланс и кинетични подходи създава математичен модел, който може да бъде решен числено само за няколко минути посредством подходящи софтуерни среди и продукти [Публикации 3b., 15b. и 16b.]. Всички извършени дейности и използвана методология при реализиране целите на конкретните изследвания допринасят за получаването на по-достоверна информация относно механизма на формиране на наноструктурите и изследвания процес. Провеждането на симулативни процедури върху такива модели системи ще осигури по-добро познаване на процеса кристализация като цяло и ще спомогне за по-задълбоченото разбиране на протичащите междинни явления.

4. Приложение на карбонатни наноструктури в инженерната химия за получаване на композитни системи

Изследвана е възможността за получаване на наноструктури в реактор (SCHMIZO) осигуряващ аксиално разбъркване на микрофазите на емулсионната среда. В хода на разработката синтезираните наноструктури са охарактеризирани посредством съвременни методи като: обемно аналитични и физични методи и трансмисионна електронна микроскопия и са насочени да се използват като изходни суровини при получаването на високотемпературни свръхпроводими керамични и стъклокерамични изделия [Публикация 10b.].

Особен интерес ще представляват генерираните от разбъркващото устройство скорости на тангенициална деформация на флуида (скорости на срязване), поради ключовата им роля за разбиване на емулсионните капки до наноразмери и протичащата в тях в последствие химична реакция. В тази връзка, чрез прилагане на CFD метода е проведено теоретично изследване, целящо анализ и сравнение на няколко турбулентни модела („k-ε“ модел на турбулентност, в неговите три форми: „Standard“, „RNG“, „Realizable“, симулационен модел за големи вихри (LES) и др.), приложени към външен поток с високо число на Рейнолдс, около илюстък обект (диск/лопатка), за да се определи най-подходящият модел за кориуса на реактор с разбъркване. Задачата е опростена до една лопатка, за да се избегнат други ефекти и изследването да се съсредоточи само върху изчислителните различията между моделите [Публикация 8b.].

Използването на наноструктурни карбонати представява едно самостоятелно изследване, свързано със създаването на композитни системи,

доказване на наличието наnanoструктурите в тях и прилагането на получените системи в практиката.

От проведен проучване се установи, че съчетаването на микромулционната техника за синтез на монодисперсни nanoдрахове на метални оксиди и карбонати е подходящи стъклокерамични технологии (золгелна технология, конвенционална керамична технология, закалка от стоплика чрез ролкова техника и др.), се оказва иновационен подход за получаването на многокомпонентни свръхпроводими керамични и стъклокерамични материали, съдържащи различни нанодобавки [Публикация 13b].

Изследвана е и е оценена каталитичната ефективност на nanoструктурирания катализатор със състав: $\text{NiO}/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ в процес на окислително дехидриране на етан до получаване на целеви продукт – етен [Публикация 4a]. Резултатите от проведените експерименти, получени при температура 851 K в присъствието на панокатализаторната система ($\text{NiO}/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$) са сравнени с експерименталните данни за същия каталитичен процес, реализиран по-рано в присъствието на катализатор $\text{VO}_x/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$. Изчислени са добивът и селективността на етен в каталитичния процес, проведен при температура 851 K. При стехиометрично съотношение на реагентите $\text{C}_2\text{H}_6/\text{O}_2=2$ се наблюдава висока по стойност селективност за използвания частично nanoструктуриран катализатор.

5. Количествена оценка на емисиите от химико-технологичното оборудване в нефтопреработвателните заводи

Направена е количествена оценка на вредните емисии от химико-технологичното оборудване по време на различните стадии на производство, преработка и съхранение на нефтопродукти. Предмет на изследванията са т.нар. неорганизирани източници на замърсяване, породени от нарушен технологичен режим, нехерметичност на апаратите и комуникациите, линса или неефективна работа на вентилационните съоръжения и др.

При определяне количеството на отделящите се газове и пари, се извършват два вида изпитания – аеродинамично, при което се определя количеството на въздуха, изсмукващ се в оборудването в зависимост от вакуума, и изпитание, при което непосредствено се определят количествата на емитираните вредни вещества от оборудването. При проведените изследвания са приложени две методики, по които, количествено са определени [Публикации 1a., 6a., 4b. и 9b.]:

- Емисиите на газове и пари, отделящи се от апарати, реактори и колони при производството и преработката на нефтопродукти от инсталации „Каталитичен плаформинг“ и „Каталитичен крекинг“;
- Количествата на емитираните въглеводороди по време на транспортните и складови операции на нефтопродукти, по-конкретно:
 - емисии от съдове (резервоари/цистерни) с единокомпонентни течности;

- емисии от резервоари/цистерни с многокомпонентни течности.

За реализирането на поставените цели се изхожда от коефициента за нехерметичност (m), непадвишаването на който гарантира издръжливостта на оборудване, работещо под налягане, на херметичност и на провежданите мероприятия. Обърнато е внимание и на процеса на молекулна дифузия на пътя на поток въздух в непълнотите на стените на съоръженията, токсичната среда в която се намира под вакуум. Анализът на изчислителните изрази от двете методики и получените резултати показват, че при повишаване обема и налягането на апаратът и молекулната маса на нефтопродуктите, количеството емитирани вредни вещества също се повишава. Единствено при повишаване на температурата в апаратът, емисиите намаляват. При повишаване обема на съда, налягането на наситените пари $Ps(38)$, молекулната маса на парите на нефтопродуктите и коефициентите зависят от тях, емисиите на вредни вещества нарастват значително [Удължени 1a., 6a., 4b. и 9b.]

В резултат на проведените изследвания, може с достатъчна за практическите изчисления точност да се определят количествата на емисиите от химико-технологичното оборудване в нефтопреработвателните заводи и да се прогнозира замърсяването на приземния въздушен слой.

20.06.2019 г.

Гр. Бургас

Подпис

/гл. ас. д-р А. Георгиева/

Подпис заличен
Чл.2 от ЗЗЛД

Page 10