

ПРОЦЕССЫ, МЕХАНИЗМЫ И КИНЕТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ОБРАЗОВАНИЯ САЖИ ПРИ ПИРОЛИЗЕ И ОКИСЛЕНИИ РАЗЛИЧНЫХ УГЛЕВОДОРОДОВ В УДАРНЫХ ВОЛНАХ

*Г.Л. Агафонов¹, И.В. Билера³, П.А. Власов^{1,2}, Ю.А. Колбановский³
В.Н. Смирнов¹, А.М. Тереза¹*

¹Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, Москва

²Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

³Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН, Москва

Кратко рассмотрены исторические аспекты изучения процесса сажеобразования и современное прикладное и фундаментальное значение исследования кинетики образования частиц сажи. Рассмотрены основные существующие методики изучения процесса сажеобразования и преимущества использования ударной трубы для этой цели.

Излагаются существующие представления о механизме сажеобразования и различные кинетические модели сажеобразования. Приводятся основные экспериментальные данные, полученные авторами по образованию частиц сажи при пиролизе и окислительном пиролизе различных соединений, таких как метан, ацетилен, этилен, этан, пропан, пропилен, ацетон, этанол, бензол, толуол, и этилбензол в широком интервале температур и концентраций исходных веществ.

Излагаются основные принципы построения детальной кинетической схемы пиролиза и окисления углеводородов в газовой фазе, гетерогенных реакций образования зародышей частиц сажи, поверхностного роста частиц сажи, коагуляции и окисления частиц сажи. Основываясь на этих принципах, развита кинетическая модель, состоящая из 3470 элементарных прямых и обратных реакций с участием 298 различных компонентов. Показано, что разработанная кинетическая модель адекватно описывает наши экспериментальные результаты и ряд литературных данных по сажеобразованию и пиролизу.

Обсуждаются нерешенные фундаментальные проблемы процесса сажеобразования и возможные пути их решения.

PROCESSES, MECHANISMS, AND KINETIC MODELS OF SOOT FORMATION IN THE PYROLYSIS AND OXIDATION OF VARIOUS HYDROCARBONS BEHIND SHOCK WAVES

*G.L. Agafonov¹, I.V. Biler³, P.A. Vlasov^{1,2}, Y. Kolbanovskiy³,
V.N. Smirnov¹, and A.M. Tereza¹*

¹Semenov Institute of Chemical Physics, RAS, Moscow

²National Research Nuclear University "MEPhI", Moscow

³Topchiev Institute of Petrochemical Synthesis, RAS, Moscow

Historical aspects of soot formation and contemporary problems in applied and fundamental studies of the kinetics of formation of soot particles are briefly considered. The basic methods for investigation of soot formation and benefits of using the shock-tube technique for this purpose are outlined. The existing mechanisms and kinetic models of soot formation are reviewed.

The basic experimental data obtained by the authors on the formation of soot particles during the pyrolysis and oxidative pyrolysis of different compounds, such as methane, acetylene, ethylene, ethane, propane, propylene, acetone, ethanol, benzene, toluene, and ethylbenzene over a wide range of temperatures and concentrations of parent compounds are presented. The principles of constructing a detailed kinetic scheme covering the pyrolysis and oxidation of hydrocarbons in the gas phase, heterogeneous reactions of nucleation of soot particles, surface growth of soot particles, coagulation, and oxidation of soot particles are described.

Based on these principles, a kinetic model composed of 3470 forward and reverse elementary reactions involving 298 different components is developed. It is demonstrated that the kinetic model adequately describes our experimental data and a number of published results on soot formation and pyrolysis.

The unsolved problems of soot formation and possible solutions are discussed.