

# РАСЧЕТ ЭНЕРГЕТИКИ ДИССОЦИАЦИИ 2-ФУРИЛ РАДИКАЛА И ПРОМЕЖУТОЧНЫХ ПРОДУКТОВ ЕГО РАСПАДА С ОБРАЗОВАНИЕМ АТОМА ВОДОРОДА МЕТОДАМИ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ И ВОЗМОЖНОСТЬ ОБРАЗОВАНИЯ $\text{HO}_2$ В ПРИСУТСТВИИ МОЛЕКУЛЯРНОГО КИСЛОРОДА

Г. А. Поскрёбышев<sup>1</sup>

**Аннотация:** На основании расчета методами теории функционала плотности (density functional theory, DFT) показано, что образование атома водорода в результате диссоциации промежуточных продуктов термического распада 2-фурил радикала ( $\text{C}_4\text{H}_3\text{O}$ ) является менее выгодным, чем образование  $\text{C}_2\text{H}_2 + \text{CHCO}$ , но более предпочтительным, чем  $\text{C}_3\text{H}_3 + \text{CO}$ . Кроме того, показано, что в присутствии молекулярного кислорода канал переноса атома водорода, ведущий к образованию  $\text{HO}_2$ , может быть доминирующим в условиях, когда скорость образования  $\text{C}_4\text{H}_3\text{O}-\text{O}_2$  несущественно превосходит скорость термического распада  $\text{C}_4\text{H}_3\text{O}$ .

**Ключевые слова:** фурил радикал; биомасло; бионефть; биотопливо; фуран; пиролиз; молекулярное моделирование; термодинамика; окисление; горение

## Литература

1. Panigrahi S., Chaudhari S. T., Bakhshi N. N., Dalai A. K. Production of synthesis gas/high-btu gaseous fuel from pyrolysis of biomass-derived oil // *Energ. Fuel.*, 2002. Vol. 16. No. 6. P. 1392–1397.
2. Xu N., Tang Ch., Meng X., Fan X., Tian Z., Huang Z. Experimental and kinetic study on the ignition delay times of 2,5-dimethylfuran and the comparison to 2-methylfuran and furan // *Energ. Fuel.*, 2015. Vol. 29. No. 8. P. 5372–5381.
3. Fulle D., Dib A., Kiefer J. H., Zhang Q., Yao J., Kern R. D. Pyrolysis of furan at low pressures: Vibrational relaxation, unimolecular dissociation, and incubation times // *J. Phys. Chem. A*, 1998. Vol. 102. No. 38. P. 7480–7486.
4. Sorkhabi O., Qi F., Rizvi A. H., Suits A. G. Ultraviolet photodissociation of furan probed by tunable synchrotron radiation // *J. Chem. Phys.*, 1999. Vol. 111. P. 100–107.
5. Yu J., Sumathi R., Green W. H., Jr. Accurate and efficient method for predicting thermochemistry of furans and ortho-arynes: Expansion of the bond-centered group additivity method // *J. Phys. Chem. A*, 2006. Vol. 110. No. 21. P. 6971–6977.

<sup>1</sup>Институт энергетических проблем химической физики им. В.Л. Тальрозе Российской академии наук; Калифорнийский технологический институт, Пасадена, Калифорния, США; gposkr@chph.ras.ru

6. *Sendt K., Bacskay G. B., Mackie J. C.* Pyrolysis of furan: Ab initio quantum chemical and kinetic modeling studies // *J. Phys. Chem. A*, 2000. Vol. 104. No. 9. P. 1861–1875.
7. *Lifshitz A., Bidani M., Bidani S.* Thermal reactions of cyclic ethers at high temperatures. III. Pyrolysis of furan behind reflected shocks // *J. Phys. Chem. A*, 1986. Vol. 90. No. 21. P. 5373–5377.
8. *Lifshitz A., Tamburu C., Shashua R.* Thermal decomposition of 2,5-dimethylfuran. Experimental results and computer modeling // *J. Phys. Chem. A*, 1998. Vol. 102. No. 52. P. 10655–10670.
9. *Поскрёбышев Г. А.* Механизм мономолекулярного распада 2-фурил радикала // Всеросс. научно-практич. конф. Авиадвигатели XXI века: тезисы докл. — Москва: ЦИАМ, 2015. С. 1083–1084. <http://www.aeroconf.ciam.ru/node/27?lang=rus>.
10. *Poskrebyshv G. A.* Mechanism of thermal decomposition of 2-furyl radical // *Chem. Phys.*, 2016. Vol. 465-466. P. 52–64.
11. *Liu D., Togbé C., Tran L. S., Felsmann D., Oßwald P., Nau P., Koppmann J., Lackner A., Glaude P. A., Sirjean B., Fournet R., Battin-Leclerc F., Kohse-Höinghaus K.* Combustion chemistry and flame structure of furan group biofuels using molecular-beam mass spectrometry and gas chromatography — Part I: Furan // *Combust. Flame*, 2014. Vol. 161. No. 3. P. 748–765.
12. *Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B., et al.* Gaussian 3, Rev. B.03. — Pittsburgh, PA, USA: Gaussian, Inc., 2003.

*Поступила в редакцию 18.12.15*