

ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ ОКИСЛЕНИЯ ТЕТРАГИДРОФУРАНА ЗА УДАРНЫМИ ВОЛНАМИ МЕТОДОМ АТОМНО-РЕЗОНАНСНОЙ АБСОРБЦИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ*

Н. С. Быстров¹, А. В. Емельянов², А. В. Еремин³, П. И. Яценко⁴

Аннотация: Представлена новая информация о кинетике окисления тетрагидрофурана (C₄H₈O). Измерены и проанализированы концентрационные профили образования и потребления атомарного кислорода (O) при окислении тетрагидрофурана молекулярным кислородом (O₂) в смеси 10 ppm C₄H₈O + 10 ppm O₂ + Ar в диапазоне температур 1650–4150 К и давлений 1,6–2,8 бар с использованием атомно-резонансной абсорбционной спектроскопии (АРАС). Прогностические способности кинетических схем горения Somers *et al.* (2013) и Wu *et al.* (2020) оценивались на основе полученных экспериментальных данных, а также использовались для определения и изучения ключевых реакционных путей, определяющих динамику окисления топливной смеси в исследуемых условиях.

Ключевые слова: биотопливо; тетрагидрофуран; горение; окисление; кинетика; атомно-резонансная абсорбционная спектроскопия (АРАС); ударная труба; ударные волны

DOI: 10.30826/CE21140404

Литература

1. Ren Y., Huang Z., Miao H., Di Y., Jiang D., Zeng K., Liu B., Wang X. Combustion and emissions of a DI diesel engine fuelled with diesel-oxygenate blends // *Fuel*, 2008. Vol. 87. P. 2691–2697. doi: 10.1016/j.fuel.2008.02.017.
2. Ji C., Liang C., Wang S. Investigation on combustion and emissions of DME/gasoline mixtures in a spark-ignition engine // *Fuel*, 2011. Vol. 90. P. 1133–1138. doi: 10.1016/j.fuel.2010.11.033.
3. Cheung C. S., Zhua R., Huang Z. Investigation on the gaseous and particulate emissions of a compression ignition engine fueled with diesel–dimethyl carbonate blends // *Sci. Total Environ.*, 2011. Vol. 409. P. 523–529. doi: 10.1016/j.scitotenv.2010.10.027.
4. Zhao H., Ge Y., Tan J., Yin H., Guo J., Zhao W., Dai P. Effects of different mixing ratios on emissions from passenger cars fueled with methanol/gasoline blends // *J. Environ. Sci.*, 2011. Vol. 23. P. 1831–1838. doi: 10.1016/S1001-0742(10)60626-2.
5. Egolfopoulos F. N., Du D. X., Law C. K. A comprehensive study of methanol kinetics in freely-propagating and burner-stabilized flames, flow and static reactors, and shock tubes // *Combust. Sci. Technol.*, 1992. Vol. 83. No. 1-3. P. 33–75. doi: 10.1080/00102209208951823.
6. Li S. C., Williams F. A. Formation of NO_x, CH₄, and C₂ species in laminar methanol flames // *P. Combust. Inst.*, 1998. Vol. 27. No. 1. P. 485–493. doi: 10.1016/S0082-0784(98)80438-4.
7. Li J., Zhao Z. W., Kazakov A., Chaos M., Dryer F. L., Scire J. J. A comprehensive kinetic mechanism for CO, CH₂O, and CH₃OH combustion // *Int. J. Chem. Kinet.*, 2007. Vol. 39. No. 3. P. 109–136. doi: 10.1002/kin.20218.
8. Marinov N. M. A detailed chemical kinetic model for high temperature ethanol oxidation // *Int. J. Chem. Kinet.*, 1999. Vol. 31. No. 3. P. 183–220. doi: 10.1002/(SICI)1097-4601.
9. Song K. H., Nag P., Litzinger T. A., Haworth D. C. Effects of oxygenated additives on aromatic species in fuel-rich, premixed ethane combustion: A modeling study // *Combust. Flame*, 2003. Vol. 135. No. 3. P. 341–349. doi: 10.1016/S0010-2180(03)00180-9.
10. Wu J. T., Song K. H., Litzinger T., Lee S. Y., Santoro R., Linevsky M., Colket M., Liscinsky D. Reduction of PAH and soot in premixed ethylene–air flames by addition of ethanol // *Combust. Flame*, 2006. Vol. 144. No. 4. P. 675–687. doi: 10.1016/j.combustflame.2005.08.036.
11. Román-Leshkov Y., Barrett C. J., Liu Z., Dumesic J. A. Production of dimethylfuran for liquid fuels from biomass-derived carbohydrates // *Nature*, 2007. Vol. 447. P. 982–985. doi: 10.1038/nature05923.
12. Zhao H., Holladay J. E., Brown H., Zhang Z. C. Metal chlorides in ionic liquid solvents convert sugars to 5-hydroxymethylfurfural // *Science*, 2007. Vol. 316. P. 1597–1600. doi: 10.1126/science.1141199.
13. Román-Leshkov Y., Barrett C. J., Liu Z., Dumesic J. A. Phase modifiers promote efficient production of hydrox-

*Работа поддержана совместным РФФИ-DFG грантом (20-58-12003/SCHU-1369/2).

¹Объединенный институт высоких температур Российской академии наук, bystrovns.jiht@gmail.com

²Объединенный институт высоких температур Российской академии наук, aemelia@jiht.ru

³Объединенный институт высоких температур Российской академии наук, eremin@jiht.ru

⁴Объединенный институт высоких температур Российской академии наук, pavelyatcenko@yandex.ru

- ymethylfurfural from fructose // *Science*, 2006. Vol. 312. P. 1933–1937. doi: 10.1126/science.1126337.
14. *Simmie J. M., Curran H. J.* Formation enthalpies and bond dissociation energies of alkylfurans. The strongest C–X bonds known? // *J. Phys. Chem. A*, 2009. Vol. 113. P. 5128–5137. doi: 10.1021/jp810315n.
 15. *Sirjean B., Fournet R.* Theoretical study of the reaction 2,5-dimethylfuran plus H → products // *P. Combust. Inst.*, 2013. Vol. 34. P. 241–249. doi: 10.1016/j.proci.2012.05.027.
 16. *Tian Z., Yuan T., Fournet R., Glaude P.-A., Sirjean B., Battin-Leclerc F., Zhang K., Qi F.* An experimental and kinetic investigation of premixed furan/oxygen/argon flames // *Combust. Flame*, 2011. Vol. 158. P. 756–773. doi: 10.1016/j.combustflame.2010.12.022.
 17. *Somers K. P., Simmie J. M., Gillespie F., Conroy C., Black G., Metcalfe W. K., Battin-Leclerc F., Dirrenberger P., Herbinet O., Glaude P.-A., Dagaut P., Togbé C., Yasunaga K., Fernandes R. X., Lee C., Tripathi R., Curran H. J.* A comprehensive experimental and detailed chemical kinetic modelling study of 2,5-dimethylfuran pyrolysis and oxidation // *Combust. Flame*, 2013. Vol. 160. Iss. 11. P. 2291–2318. doi: 10.1016/j.combustflame.2013.06.007.
 18. *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. P. 748–765. doi: 10.1016/j.combustflame.2013.05.028.
 19. *Tran L.-S., Togbé C., Liu D., Felsmann D., Oßwald P., Glaude P.-A., Fournet R., Sirjean B., Battin-Leclerc F., Kohse-Höinghaus K.* Combustion chemistry and flame structure of furan group biofuels using molecular-beam mass spectrometry and gas chromatography — Part II: 2-methylfuran // *Combust. Flame*, 2014. Vol. 161. P. 766–779. doi: 10.1016/j.combustflame.2013.05.027.
 20. *Togbé C., Tran L.-S., Liu D., Felsmann D., Oßwald P., 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 III: 2,5-dimethylfuran // *Combust. Flame*, 2014. Vol. 161. P. 780–797. doi: 10.1016/j.combustflame.2013.05.026.
 21. *Tran L.-S., Sirjean B., Glaude P.-A., Kohse-Höinghaus K., Battin-Leclerc F.* Influence of substituted furans on the formation of polycyclic aromatic hydrocarbons in flames // *P. Combust. Inst.*, 2015. Vol. 35. P. 1735–1743. doi: 10.1016/j.proci.2014.06.137.
 22. *Conturso M., Sirignano M., D’Anna A.* Effect of furanic biofuels on particles formation in premixed ethylene–air flames: An experimental study // *Fuel*, 2016. Vol. 175. P. 137–145. doi: 10.1016/j.fuel.2016.02.038.
 23. *Sirjean B., Fournet R., Glaude P.-A., Battin-Leclerc F., Wang W., Oehlschlaeger M. A.* Shock tube and chemical kinetic modeling study of the oxidation of 2,5-dimethylfuran // *J. Phys. Chem. A*, 2013. Vol. 117. P. 1371–1392. doi: 10.1021/jp308901q.
 24. *Somers K. P., Simmie J. M., Gillespie F., Burke U., Connolly J., Metcalfe W. K., Battin-Leclerc F., Dirrenberger P., Herbinet O., Glaude P.-A., Curran H. J.* A high temperature and atmospheric pressure experimental and detailed chemical kinetic modelling study of 2-methyl furan oxidation // *P. Combust. Inst.*, 2013. Vol. 34. P. 225–232. doi: 10.1016/j.proci.2012.06.113.
 25. *Eldeeb M. A., Akih-Kumgeh B.* Reactivity trends in furan and alkyl furan combustion // *Energ. Fuel.*, 2014. Vol. 28. P. 6618–6626. doi: 10.1021/ef501181z.
 26. *Xu N., Tang C., 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. P. 5372–5381. doi: 10.1021/acs.energyfuels.5b00906.
 27. *Somers K. P., Simmie J. M., Metcalfe W. K., Curran H. J.* The pyrolysis of 2-methylfuran: A quantum chemical, statistical rate theory and kinetic modelling study // *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2014. Vol. 16. P. 5349–5367. doi: 10.1039/C3CP54915A.
 28. *Wu Y., Xu N., Yang M., Liu Y., Tang C., Huang Z.* Ignition delay time measurement and kinetic modeling of furan, and comparative studies of 2,3-dihydrofuran and tetrahydrofuran at low to intermediate temperatures by using a rapid compression machine // *Combust. Flame*, 2020. Vol. 213. P. 226–36. doi: 10.1016/j.combustflame.2019.12.010.
 29. *Bystrov N. S., Emelianov A. V., Eremin A. V., Yatsenko P. I.* Direct measurements of rate coefficients for thermal decomposition of CF₃I using shock-tube ARAS technique // *J. Phys. D Appl. Phys.*, 2018. Vol. 51. P. 184–204. doi: 10.1088/1361-6463/aab8e5.
 30. *Bystrov N., Emelianov A., Eremin A., Loukhovitski B., Sharipov A., Yatsenko P.* Experimental study of high temperature oxidation of dimethyl ether, *n*-butanol and methane // *Combust. Flame*, 2020. Vol. 218. P. 121–133. doi: 10.1016/j.combustflame.2020.04.003.
 31. *Capriolo G., Bystrov N., Emelianov A., Eremin A., Yatsenko P., Konnov A. A.* High-temperature oxidation of propanol isomers in the mixtures with N₂O at high Ar dilution conditions // *Fuel*, 2021. Vol. 287. P. 119499. doi: 10.1016/j.fuel.2020.119499.
 32. *Dove J. E., Nip W. S., Teitelbaum H.* The vibrational relaxation and pyrolysis of shock heated nitrous oxide // *Symposium (International) on Combustion*, 1975. Vol. 15. P. 903–916. doi: 10.1016/S0082-0784(75)80357-2.
 33. *Pamidimukkala K. M., Lifshitz A., Skinner G. B., Wood D. R.* Resonance absorption measurements of atom concentrations in reacting gas mixtures. VI. Shapes of the vacuum ultra-violet oxygen (³S–³P) resonance triplet from microwave sources and empirical calibration in a shock tube // *J. Chem. Phys.*, 1981. Vol. 75. P. 1116–1122.
 34. *Sutherland J. W., Klemm R. B.* Rate constants for the thermal dissociation of N₂O and the O(³P) + N₂O reaction // *J. Phys. Chem. A*, 1997. Vol. 101. P. 1104–1116. doi: 10.1021/jp962416y.
 35. *Naudet V., Abid S., Paillard C. E.* A high temperature chemical kinetics study of the O₂ dissociation and the O atoms recombination by ARAS // *J. Chem. Phys.*, 1999. Vol. 96. P. 1123–1145. doi: 10.1051/jcp:1999203.

36. Быстров Н. С., Емельянов А. В., Еремин А. В., Яценко П. И. Экспериментальное исследование реакции *n*-бутанола с кислородом за ударными волнами АРАС методом // Физико-химическая кинетика в газовой динамике, 2019. Т. 20. Вып. 1. 15 с. doi: 10.33257/PhChGD.20.1.799.
37. CHEMKINPRO, Reaction Design. <https://www.cgd-ku.com/library/ne56070/>.
38. Cuoci A., Frassoldati A., Faravelli T., Ranzi E. OpenSMOKE++: An object-oriented framework for the numerical modeling of reactive systems with detailed kinetic mechanisms // Comput. Phys. Commun., 2015. Vol. 192. P. 237–264. doi: 10.1016/j.cpc.2015.02.014.
39. Laskin A., Wang H., Law C. K. Detailed kinetic modeling of 1,3-butadiene oxidation at high temperatures // J. Chem. Phys., 2000. Vol. 32. P. 589–614. doi: 10.1002/1097-4601.
40. Hung Wei-Chung, Tsai Chieh-Ying, Matsui Hiroyuki, Wang Niann-Shiah, Miyoshi Akira. Experimental and theoretical study on the thermal decomposition of C₃H₆ (propene) // J. Phys. Chem. A, 2015. Vol. 119. No. 8. P. 1229–1237. doi: 10.1021/jp5102169.
41. Weber I., Golka L., Olzmann M. Thermal decomposition of propene: A shock-tube/H-ARAS and modeling study // P. Combust. Inst., 2017. Vol. 36. No. 1. P. 299–306. doi: 10.1016/j.proci.2016.06.091.
42. Smith G. P., Golden D. M., Frenklach M., Moriarty N. W., Eiteneer B., Goldenberg M., Bowman C. T., Hanson R. K., Song Soonho, Gardiner W. C., Jr., Lissianski V. V., Qin Zhiwei. GRI-Mech. combustion.berkeley.edu/gri-mech/.
43. Wang H., You X., Joshi A. V., Davis S. G., Laskin A., Egolfopoulos F., Law C. K. USC Mech Version II. High-temperature combustion reaction model of H₂/CO/C₁–C₄ compounds. http://ignis.usc.edu/USC_Mech_II.htm.
44. Zhou C.-W., Li Y., Burke U., Banyon C., Somers K. P., Khan S., Hargis J. W., Sikes T., Petersen E. L., AlAbbad M., Farooq A., Pan Y., Zhang Y., Huang Z., Lopez J., Loparo Z., Vasu S. S., Curran H. J. An experimental and chemical kinetic modeling study of 1,3-butadiene combustion: Ignition delay time and laminar flame speed measurements // Combust. Flame, 2018. Vol. 197. P. 423–438. doi: 10.1016/j.combustflame.2018.08.006.
45. Yingtao W., Panigrahy S., Sahu A. B., Bariki C., Liang J., Mohamed A., Dong S., Tang C., Pitsch H., Huang Z., Curran H. J. Understanding the antagonistic effect of methanol as a component in surrogate fuel models: A case study of methanol/*n*-heptane mixtures // Combust. Flame, 2021. Vol. 226. P. 229–242. doi: 10.1016/j.combustflame.2020.12.006.

Поступила в редакцию 15.11.2021