

АНАЛИЗ МЕТОДИК РАСЧЕТОВ КИНЕТИКИ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ В УСЛОВИЯХ АДИАБАТИЧЕСКОГО СЖАТИЯ–РАСШИРЕНИЯ*

И. В. Билера¹

Аннотация: Проведен анализ методик кинетической обработки экспериментальных данных, полученных в реакторах адиабатического сжатия (АС) газов свободным поршнем. Среди них — различные варианты, основанные на совместном решении системы уравнений, состоящих из уравнения движения поршня, адиабаты Пуассона, закона сохранения энергии и уравнения состояния; методики, основанные на измерении отклонения от адиабатичности при сжатии концентрированных смесей; приближенная методика, разработанная в ИНХС РАН, а также методика определения кинетических констант при самовоспламенении горючего газа, предложенная Бабкиным и Сеначиным. Показано, что в настоящее время для АС газов свободным поршнем не существует методики определения скорости химической реакции по экспериментальным данным во всем диапазоне степеней превращения исходного вещества и, следовательно, в широком температурном диапазоне. Наиболее перспективный путь для ее создания — совершенствование методики ИНХС РАН.

Ключевые слова: адиабатическое сжатие; реактор адиабатического сжатия; свободнопоршневой компрессор; кинетика; методика

DOI: 10.30826/CE22150201

EDN: ZRXVZY

Литература

1. *Рябинин Ю. Н.* Газы при больших плотностях и высоких температурах. — М.: Физматгиз, 1959. 71 с.
2. *Колбановский Ю. А., Щипачев В. С., Черняк Н. Я. и др.* Импульсное сжатие газов в химии и технологии / Отв. ред. Ю. А. Колбановский. — М.: Наука, 1982. 240 с.
3. *Колбановский Ю. А.* Метод адиабатического сжатия в исследованиях кинетики и механизма реакций с участием фторсодержащих карбенов // Успехи химии, 1989. Т. 58. № 11. С. 1800–1814.
4. *Buravtsev N. N., Kolbanovsky Yu. A.* Intermediates of thermal transformations of perfluoro-organic compounds. New spectral data and reactions // J. Fluorine Chem., 1999. Vol. 96. No. 1. P. 35–42.
5. *Билера И. В.* Гомогенный пиролиз *n*-бутана в условиях адиабатического сжатия // Горение и взрыв, 2014. Вып. 7. С. 35–41.
6. *Билера И. В.* Гомогенный пиролиз 2-метилпентана в условиях адиабатического сжатия // Горение и взрыв, 2020. Т. 13. № 1. С. 33–41. doi: 10.30826/CE20130103.
7. *Билера И. В.* Сопиролиз диметилового эфира и этана в условиях адиабатического сжатия // Горение и взрыв, 2020. Т. 13. № 4. С. 20–28. doi: 10.30826/CE20130403.
8. *Buravtsev N. N., German L. S., Grigor'ev A. S., Kolbanovskii Yu. A., Ovsyannikov A. A., Volkonskii A. Yu.* Trifluoromethylfluorocarbene formation and reactions under C₂F₅SiF₃ pulsed adiabatic compression pyrolysis // Mendeleev Commun., 1993. Vol. 3. No. 4. P. 133–134. doi: 10.1070/MC1993v003n04ABEH000254.
9. *Ямпольский Ю. П.* Элементарные реакции и механизм пиролиза углеводородов. — М.: Химия, 1990. 216 с.
10. *Маркевич А. М., Азатян В. В., Соколова Н. А.* Адиабатическое сжатие как метод изучения химических процессов в нестационарных условиях // Кинетика и катализ, 1962. Т. 3. № 3. С. 431–438.
11. *Волохонович И. Е., Маркевич А. М., Мастеровой И. Ф., Азатян В. В.* Неизотермические процессы. Термокрекинг метана // Докл. Акад. наук, 1962. Т. 146. № 2. С. 387–390.
12. *Kondratiev V. N.* Determination of the rate constant for thermal cracking of methane by means of adiabatic compression and expansion // Symposium (International) on Combustion Proceedings, 1965. Vol. 10. No. 1. P. 319–322. doi: 10.1016/S0082-0784(65)80178-3.
13. *Вурзель Ф. Б., Полак Л. С., Щипачев В. С.* Разложение тетрафторсилана при адиабатическом сжатии // Кинетика и катализ, 1966. Т. 7. № 6. С. 1068–1071.
14. *Кондратьев В. Н.* Термическое разложение метана // Химическая кинетика и цепные реакции. — М.: Наука, 1966. С. 165–172.
15. *Саркисян В. К., Паронян Р. В.* Термический крекинг ацетилена в условиях адиабатического сжатия и расширения // Хим. ж. Армении, 1972. Т. 25. № 7. С. 551–559.
16. *Баранник Г. Б., Бабкин В. С.* Разложение формальдегида в присутствии кислорода при адиабатическом

*Работа выполнена в рамках Государственного задания ИНХС РАН.

¹Институт нефтехимического синтеза им. А. В. Топчиева Российской академии наук, bilera@ips.ac.ru

- сжатию // Физика горения и взрыва, 1973. Т. 9. № 3. С. 416–420.
17. Саркисян В. К. К расчету кинетических параметров химических газовых реакций, изучаемых методом адиабатического сжатия // Кинетика и катализ, 1974. Т. 15. № 3. С. 560–564.
18. Веремьев Е. С., Кислых В. В., Сидельников А. Е. Исследование разложения закиси азота при давлениях 1500–2000 атм // Кинетика и катализ, 1972. Т. 13. № 2. С. 269–273.
19. Olschewski H. A., Troe J., Wagner H. Gg. Niederdruckbereich und Hochdruckbereich des unimolekularen N_2O -Zerfalls // Ber. Bunsen. Phys. Chem., 1966. Vol. 70. No. 4. P. 450–459. doi: 10.1002/bbpc.19660700409.
20. Rohrig M., Petersen E. L., Davidson D. F., Hanson R. K. The pressure dependence of the thermal decomposition of N_2O // Int. J. Chem. Kinet., 1996. Vol. 28. No. 8. P. 599–608. doi: 10.1002/(SICI)1097-4601(1996)28:8<3C599::AID-KIN5%3E3.0.CO;2-Q.
21. Мержанов А. Г. Неизотермические методы в химической кинетике // Физика горения и взрыва, 1973. Т. 9. № 1. С. 4–36.
22. Бабкин В. С., Сеначин П. К. Процессы горения газа в ограниченных объемах. — Барнаул: АлтГТУ, 2017. 143 с.
23. Игонина И. В., Полак Л. С., Щипачев В. С. Расчет кинетики превращений метано-водородной смеси в условиях адиабатического сжатия и расширения // Кинетика и катализ, 1968. Т. 9. № 1. С. 15–23.
24. Глебов Д. В., Полякова М. Е., Щипачев В. С. Методы обработки результатов кинетических экспериментов на установках адиабатического сжатия // Исследование химических реакций при адиабатическом сжатии газов. — М.: Наука, 1978. С. 74–88.
25. Шевелькова Л. В., Иванюк А. В., Наметкин Н. С. Сравнительное изучение пиролиза *n*-бутана и изобутана // Нефтехимия, 1980. Т. 20. № 6. С. 837–845.
26. Wittig S. L. K. Study of the thermal decomposition of *n*-butane // Phys. Fluids (1958–1988), 1969. Vol. 12. No. 5. I-133–I-135.
27. Колбановский Ю. А., Полякова М. Е. Решение простейшей обратной задачи химической кинетики в наиболее общей постановке методом глобальной оптимизации // Кинетика и катализ, 1981. Т. 22. № 4. С. 882–887.

Поступила в редакцию 28.01.2022