ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

**МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«Перспективные материалы с иерархической структурой
для новых технологий и надежных конструкций»**

**X МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«Химия нефти и газа»**

Томск

Издательский Дом ТГУ

2018

DOI: 10.17223/9785946217408/538

**ОСОБЕННОСТИ ОКИСЛЕНИЯ ИЗОБУТАНА В ВЫСОКОПЛОТНОМ
ВОДЯНОМ ПАРЕ И ДИОКСИДЕ УГЛЕРОДА**

Востриков А.А., Федяева О.Н., Шишкин А.В., Артамонов Д.О., Сокол М.Я.
ФГБУН Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск, Россия
rakhot@yandex.ru

Одной из актуальных проблем топливной энергетики и нефтегазовой отрасли является неконтролируемый выброс в атмосферу парниковых газов, токсичных веществ и сажи при сжигании углеводородных топлив. Эта проблема может быть решена в рамках новой концепции развития топливной энергетики, основанной на использовании сверхкритической воды (СКВ: $T > 647$ К, $P > 22.1$ МПа) и замкнутых реакционных систем [1,2]. Положительный экологический эффект использования СКВ обусловлен способностью СКВ растворять органические вещества и газы, возможностью удалять CO_2 в жидком виде из-за высокого давления реагентов, и низкой температурой реализации процесса, препятствующей образованию оксидов NO_x , SO_2 и сажи [3,4].

В докладе представлены результаты исследования влияния водяного пара и диоксида углерода на окисление изобутана при недостатке кислорода в условиях высокой плотности реагентов при их равномерном нагреве до 590 К [5]. Получены данные о кинетике, температуре самовоспламенения и продуктах превращения изобутана. Показано, что самовоспламенение является двух-стадийным и начинается при температуре 510-522 К. Автоускорение окисления подавляется высокой теплоемкостью реакционной смеси.

Впервые выявлена важная роль резонансных обменов колебательной энергией в системах $\text{H}_2\text{O}/\text{O}_2$ и $\text{CO}_2/\text{i-C}_4\text{H}_{10}$ в превращениях изобутана. Высокая степень окисления изобутана в водяном паре реализовалась, прежде всего, вследствие колебательного возбуждения молекул O_2 по механизму резонансного V-V обмена с молекулами H_2O^* . Высокая конверсия изобутана в среде CO_2 при низком потреблении O_2 объясняется высокой плотностью CO_2 и наличием V-V резонансов в системе $\text{CO}_2/\text{i-C}_4\text{H}_{10}$. Различие механизмов превращения изобутана в среде $\text{H}_2\text{O}/\text{O}_2$ и CO_2/O_2 стало причиной различия выхода и состава реактантов, что установлено по результатам масс-спектрометрического анализа. Отмечено активное участие молекул воды в окислительно-восстановительных реакциях, что приводит к увеличенному выходу H_2 и CO_2 при окислении изобутана в среде $\text{H}_2\text{O}/\text{O}_2$ по сравнению с окислением в среде CO_2/O_2 .

Литература

1. Vostrikov A.A., Dubov D.Yu., Sokol M.Ya., Fedyaeva O.N. Partial and complete oxidation of brown coal in a supercritical water–oxygen fluid under conditions of counterflowing reactant streams // Russ. J. Phys. Chem. B. – 2016. – V. 10, No 8. P. 1256–1263.
2. Vostrikov A.A., Fedyaeva O.N., Shishkin A.V., Sokol M.Ya., Kolobov F.I., Kolobov V.I. Partial and complete methane oxidation in supercritical water // J. Eng. Thermophysics. – 2016. – V. 25, No 4. P. 474–484.
3. Fedyaeva O.N., Vostrikov A.A., Shishkin A.V., Sokol M.Y., Fedorova N.I., Kashirtsev V.A. Hydrothermolysis of brown coal in cyclic pressurization-depressurization mode // J. Supercrit. Fluids. – 2012. V. 62. P. 155–164.
4. Vostrikov A.A., Fedyaeva O.N., Kolobov V.I., Conversion of tar in supercritical water/oxygen fluid with soot suppression // J. Eng. Thermophysics. – 2017. – V. 26, No 1. P. 1–9.
5. Vostrikov A.A., Fedyaeva O.N., Shishkin A.V., Artamonov D.O., Sokol M.Ya. Features of low-temperature oxidation of isobutane in water vapor and carbon dioxide with increased density of reagents // J. Eng. Thermophysics. – 2017. – V. 26, No 4. P. 466–475.