

**ОКИСЛЕНИЕ БЕНЗ(А)ПИРЕНА В СРЕДЕ КИСЛОРОДА И
ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ ПРОЦЕССА**

Макалада бенз(а)пирендин кычкылтектуу чөйрөдө сунун катышуусу менен жүргөн кычкылдануу процесстери каралды жана системанын максимум энтропиясында газ фазасынын тең салмактуу курамдары табылды. Газ фазасында конденсирленген көмүртектин (ыш) жана бенз(а)пирендин концентрацияларынын азайышы көргөзүлдү.

В статье рассмотрены процессы окисления бенз(а)пирена в кислородной среде с участием воды и найдены равновесные составы газовой фазы при максимуме энтропии системы. Показано снижение концентрации конденсированного углерода (сажи) в газовой фазе и соответственно бенз(а)пирена.

In this article the processes of benz(a)pyrene oxidation in oxygen by involving water were discussed and the equilibrium composition of the gas phase at the maximum entropy of system was found. The concentrations reduce of condensed carbon (soot) and also benz(a)pyrene in the gas phase were shown.

В работе изучена система $C_{20}H_{12} - H_2O - O_2$ (1:1:1) при $P=0,1$ МПа, $T=500-2500$ К, $\mu=51,39$ моль/кг, $MMq=20,23$ г/моль, $Rq=416,16$ Дж/(кг·К), $z=0,03$ при $P=0,1$ МПа, $T=500-2500$ К, $\mu=74,99$ моль/кг, $MMq=14,22$ г/моль, $Rq=600,38$ Дж/(кг·К), $z=0,18$ и выявлено изменение ее энергетических, тепловых и вязкостных свойств при максимуме энтропии системы [1,2]: удельного объема (V , м³/кг); энтропии (S , кДж/(кг·К)); полной энтальпии (I , кДж/кг); полной внутренней энергии (U , кДж/кг); удельной теплоемкости (C_p , кДж/(кг·К)); динамической вязкости (μ , Па·с); теплопроводности (Lt' , Вт/(м·К)); число Прандтля (Pr') (табл.1).

Полученные данные представлены в табл.1-2 и на рис.1-2. Равновесные составы компонентов, образующихся в системе $C_{20}H_{12} - H_2O - O_2$ (1:1:1) следующие: O , O_2 , H , H_2 , OH , HO_2 , H_2O , H_2O_2 , $C(s)$, C , CO , CO_2 , C_2O , C_3O_2 , CH , CH_2 , CH_3 , CH_4 , C_2H , C_2H_2 , C_2H_3 , C_2H_4 , C_2H_5 , C_2H_6 , C_3H_8 , CHO , CHO_2 , CH_2O , CH_2O_2 , CH_3O , $C_2H_4O_2$, C_3H_6O . Основным продуктом конверсии бензапирена в газовой фазе с участием воды и кислорода были: H , H_2 , OH , H_2O , O , O_2 , $C(s)$, CO , CO_2 , CH_4 (рис.1) и их концентрации составили (моль/кг): молекулярного водорода $0,204315-15,7188$; оксида углерода $0,000726-23,9069$; конденсированного углерода $C(s)$ $13,5602-5,75E-29$; диоксида углерода $9,70834-2,51505$; воды $19,9196-10,2973$; метана $3,15279-1,21E-08$; ацетилен $4,05E-22-5,04E-11$; атомарного водорода $1,81E-20-0,728609$; C_2H $1,93E-22-4,26E-13$.

Полученные данные убедительно показали, что концентрация конденсированного углерода $C(s)$, т.е. сажи наименьшая в системе $C_{20}H_{12} - H_2O - O_2$ (1:1:1) (рис.2), соответственно содержание бензапирена незначительно в газовой фазе.

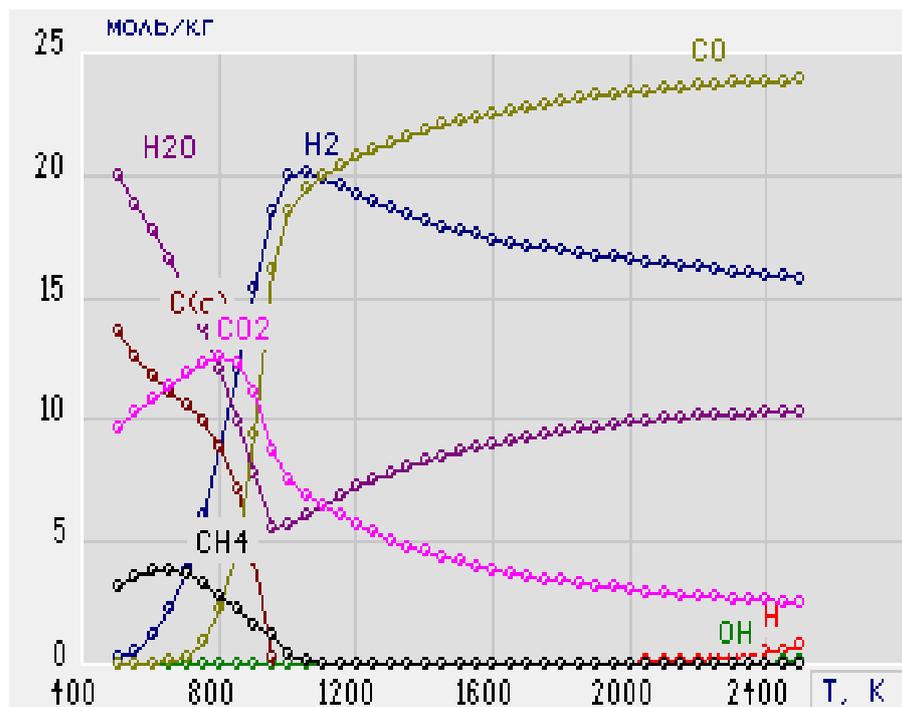


Рис.1. Равновесные составы и концентрации компонентов, образующихся в системе $C_{20}H_{12} - H_2O - O_2$ (1:1:1)

Таблица 1

Изменение свойств системы: $C_{20}H_{12} - H_2O - O_2$ (1:1:1) при $P=0,1$ МПа, $T=500-2500$ К, $\mu=51,39$ моль/кг, $MMq=20,23$ г/моль, $Rq=416,16$ Дж/(кг·К), $z=0,03$

T, К	$V \cdot 10^2, \text{ м}^3/\text{кг}$	$S, \text{ кДж}/(\text{кг} \cdot \text{К})$	$I, \text{ кДж}/\text{кг}$	$U, \text{ кДж}/\text{кг}$	$C_p \cdot 10^4, \text{ кДж}/(\text{кг} \cdot \text{К})$	$Mu \cdot 10^5, \text{ Па} \cdot \text{с}$	$Lt \cdot 10^5, \text{ Вт}/(\text{м} \cdot \text{К})$	$Pr \cdot 10^3$
500	137,128	7,488	-8594,57	-8649,93	18180	1,99	21835,1	161,061
750	226,894	8,689	-7825,19	-7961,89	56042,2	2,96	226945	77,51
1000	433,363	11,677	-5199,81	-5503,96	45817,1	3,82	40225,2	434,87
1250	549,26	12,253	-4562,37	-4980,62	21524,2	4,44	17895	534,282
1500	659,143	12,641	-4029,87	-4558	21199,7	5,02	20394,6	522,188
1750	769,049	12,969	-3498,3	-4136,33	21403,3	5,57	22963,2	519,532
2000	879,277	13,259	-2954,29	-3702,49	22283,2	6,1	25549,7	531,817
2250	990,939	13,534	-2370,7	-3230,33	24811	6,6	38039,5	430,389
2500	1107,24	13,823	-1683,46	-2658,66	31020,4	7,08	65239,8	336,625

Таблица 2

Равновесные составы и концентрации компонентов (моль/кг), образующихся в системе:
 $C_{20}H_{12} - H_2O - O_2$ (1:1:1), при $P=0,1$ МПа, $T=500-2500$ К

Состав	Температура, К									
	500	750	1000	1250	1500	1750	2000	2250	2500	
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	
O	1,93E-22	1,93E-22	2,04E-19	5,02E-14	1,98E-10	7,25E-08	6,05E-06	0,000189	0,002982	
O ₂	1,93E-22	1,93E-22	3,22E-20	9,95E-15	4,51E-11	1,78E-08	1,55E-06	4,96E-05	0,000796	
H	1,81E-20	4,72E-12	7,33E-08	1,53E-05	0,000539	0,00698	0,048136	0,217494	0,728609	
H ₂	0,204315	6,10897	19,9934	18,8763	17,7163	17,0025	16,5257	16,1433	15,7188	
OH	1,93E-22	1,79E-15	4,62E-11	6,28E-08	7,53E-06	0,000225	0,00285	0,020403	0,098078	
HO ₂	1,93E-22	1,93E-22	1,93E-22	9,96E-18	4,78E-14	1,96E-11	1,76E-09	5,79E-08	9,42E-07	
H ₂ O	19,9196	13,7266	5,70685	7,55091	8,71283	9,42343	9,87833	10,1673	10,2973	
H ₂ O ₂	1,93E-22	1,93E-22	4,06E-19	3,88E-15	1,7E-12	1,27E-10	3,18E-09	3,87E-08	2,84E-07	
C(c)	13,5602	9,8716	1,28E-28	1E-30	1E-30	1E-30	1E-30	2,86E-30	5,75E-29	
C	1,93E-22	1,93E-22	1,93E-22	1,93E-22	1,34E-18	9,86E-16	1,41E-13	6,72E-12	1,49E-10	
CO	0,000726	0,896433	18,4846	21,0557	22,2198	22,9307	23,3882	23,695	23,9069	
CO ₂	9,70834	12,357	7,57277	5,36521	4,20218	3,49133	3,03379	2,72704	2,51505	
C ₂ O	1,93E-22	1,93E-22	4,87E-19	2,86E-16	1,96E-14	4,14E-13	4,16E-12	2,54E-11	1,09E-10	
C ₃ O ₂	1,93E-22	1,75E-17	3,79E-13	3,05E-13	2,53E-13	2,29E-13	2,17E-13	2,12E-13	2,09E-13	

продолжение табл. 2

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
CH	1,93E-22	1,93E-22	1,93E-22	3,83E-20	5,06E-17	8,75E-15	4,23E-13	8,7E-12	9,76E-11
CH ₂	1,93E-22	1,93E-22	2,98E-17	8,88E-15	3,76E-13	5,54E-12	4,2E-11	2,04E-10	7,13E-10
CH ₃	2,67E-18	3,74E-11	2,46E-08	1,87E-08	1,47E-08	1,26E-08	1,15E-08	1,07E-08	9,99E-09
CH ₄	3,15279	3,29695	0,364632	0,001131	2,29E-05	1,48E-06	1,97E-07	4,19E-08	1,21E-08
C ₂ H	1,93E-22	1,93E-22	9,25E-21	3,14E-18	1,48E-16	2,44E-15	2,06E-14	1,11E-13	4,26E-13
C ₂ H ₂	4,05E-22	9,31E-13	6,16E-09	1,18E-09	3,77E-10	1,76E-10	1,03E-10	6,92E-11	5,04E-11
C ₂ H ₃	1,93E-22	1,91E-17	5,22E-13	1,71E-13	7,62E-14	4,51E-14	3,15E-14	2,42E-14	1,94E-14
C ₂ H ₄	4,47E-12	1,26E-07	1,13E-06	2,27E-09	3,41E-11	1,81E-12	2,1E-13	4E-14	1,05E-14
C ₂ H ₅	9,87E-21	9,05E-14	9,07E-12	5,72E-14	1,81E-15	1,64E-16	2,85E-17	7,43E-18	2,5E-18
C ₂ H ₆	1,88E-06	1,77E-05	1,18E-06	7,01E-11	9,96E-14	9,96E-16	3,33E-17	2,44E-18	2,98E-19
C ₃ H ₈	1,2E-11	4,78E-10	1,36E-11	1,29E-17	1,16E-21	1,93E-22	1,93E-22	1,93E-22	1,93E-22
CHO	1,93E-22	6,4E-14	8,14E-10	3,28E-08	3,69E-07	2,08E-06	7,6E-06	2,08E-05	4,64E-05
CHO ₂	3,55E-21	4,01E-14	4,72E-11	2,33E-09	3,05E-08	1,9E-07	7,47E-07	2,18E-06	5,12E-06
CH ₂ O	4,11E-12	1,06E-07	4,02E-06	3,7E-06	3,36E-06	3,16E-06	3,04E-06	2,97E-06	2,89E-06
CH ₂ O ₂	1,4E-08	1,17E-06	2,46E-06	2,1E-06	1,86E-06	1,73E-06	1,66E-06	1,62E-06	1,59E-06
CH ₃ O	1,93E-22	2,11E-19	1,38E-15	2,1E-14	1,23E-13	4,45E-13	1,18E-12	2,56E-12	4,71E-12
C ₂ H ₄ O ₂	1,25E-10	2,68E-09	5,82E-10	3,37E-12	1,08E-13	9,73E-15	1,66E-15	4,27E-16	1,42E-16
C ₃ H ₆ O	1,24E-15	2,05E-12	8,12E-13	3,33E-17	3,71E-20	3,16E-22	1,93E-22	1,93E-22	1,93E-22

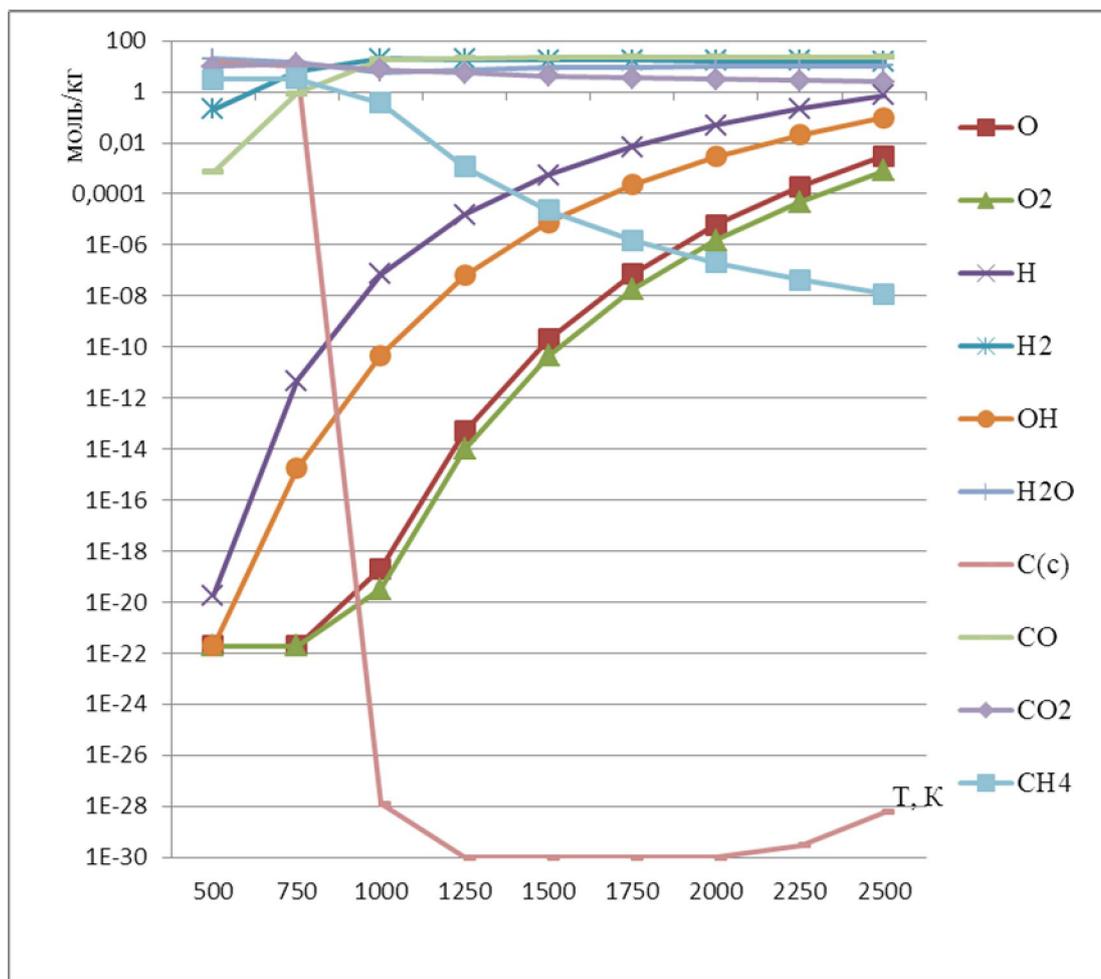


Рис.2. Равновесные составы и концентрации компонентов, образующихся в системе $C_{20}H_{12} - H_2O - O_2$ (1:1:1)

Показано, что при стехиометрическом соотношении исходных компонентов в реакции окисления бензапирена с участием воды количество кислорода составляет 23 моля. Соответственно, была моделирована система $C_{20}H_{12} - H_2O - O_2$ (1:1:23) и выявлено изменение ее энергетических свойств при $P=0,1$ МПа, $T=500-2500$ К, $\mu=31,51$ моль/кг, $MMq=31,73$ г/моль, $Rq=262,03$ Дж/(кг·К), $z=0$. Показано, что в системе $C_{20}H_{12} - H_2O - O_2$ (1:1:23) конденсированный углерод вообще отсутствует, т.е. сажа полностью выгорает, поэтому при таких режимах бензапирен в газовой фазе возможно находится в микроследовых количествах.

Список литературы

1. Маймеков З.К., Самбаева Д.А., Кемелов К.А. Окисление бенз(а)пирена в кислородной среде с целью лимитирования влияния диоксида углерода на изменение климата - Вестник КРСУ
2. Сиянрев Г.Б., Ватолин Н.А., Трусов Б.Г., Моисеев Г.К. Применение ЭВМ для термодинамических расчетов металлургических процессов - Москва: Наука, 1982