

**ДЕСТРУКЦИЯ БЕНЗ(А)ПИРЕНА В СРЕДЕ ВОДА-КИСЛОРОД И  
ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ НИЗКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ  
КОМПОНЕНТОВ И ЧАСТИЦ В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ**

*Самбаева Дамира Асанакуновна, чл-корр. ИА КР, д.т.н., профессор, Институт горного дела и горных технологий им.академика У. Асаналиева КГТУ им. И.Раззакова, Кыргызстан, 720001, г.Бишкек, пр. Чуй, 215, e-mail: [d.sambaeva@gmail.com](mailto:d.sambaeva@gmail.com) ORCID 0000-0002-9834-341X*

*Кемелов Кубат Амантурович, младший научный сотрудник, Кыргызско-Турецкий Университет «Манас», Кыргызстан, 720038, г.Бишкек, мкр. Джал, e-mail: [kubat.space@mail.ru](mailto:kubat.space@mail.ru) ORCID 0000-0001-7375-6325*

*Маймеков Зарлык Капарович, академик ИА КР, д.т.н., профессор, Кыргызско-Турецкий Университет «Манас», Кыргызстан, 720038, г.Бишкек, мкр. Джал, e-mail: [z.maymekov@mail.ru](mailto:z.maymekov@mail.ru) ORCID 0000-0002-9117-262X*

*Молдобаев Мирлан Болотбекович, младший научный сотрудник, Кыргызско-Турецкий Университет «Манас», Кыргызстан, 720038, г.Бишкек, мкр. Джал, e-mail: [mika2004.85@mail.ru](mailto:mika2004.85@mail.ru) ORCID 0000-0002-8710-5643*

*Сулайманова Айжамал Жалиловна, студент, Институт горного дела и горных технологий им.академика У Асаналиева КГТУ им. И.Раззакова, Кыргызстан, 720001, г.Бишкек, пр. Чуй, 215, e-mail: [aizhamalsulaimanova@gmail.com](mailto:aizhamalsulaimanova@gmail.com)*

**Аннотация.** Изучены системы: бенз(а)пирен-кислород, бенз(а)пирен-вода, бенз(а)пирен-вода-кислород при максимуме энтропии системы. Отмечено, что эксперименты по определению концентрации бенз(а)пирена в сажевых частицах газовой фазы проведены на хроматографических оборудованьях типа «Agilent Technologies 7890A» (ГХ), «Agilent 1200» (HPLC - Agilent Technologie) и «Waters 2690 Separations Module» (Waters Alliance). В опытах также был использован флуориметрический детектор «RF 551» (Shimadzu). Сбор и обработка данных произведены на основе программно-аппаратного комплекса «Chemstation». На основании хроматограммы стандартных проб БП построен градуировочный график в зависимости концентрации бенз(а)пирена от площади пика. Установлены равновесные составы и концентрации компонентов, частиц и их распределение в газовой фазе (O, O<sub>2</sub>, H, H<sub>2</sub>, OH, HO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, H<sub>2</sub>O, C, CO, CO<sub>2</sub>, CH, CH<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub>, CH<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, C<sub>3</sub>H, CHO, CHO<sub>2</sub>, CH<sub>2</sub>O, CH<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub>O, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>O<sub>2</sub>, O<sub>3</sub>) при различных температурах (T=500-2500 K) и соотношениях газожидкостных потоков. Отмечено, что бенз(а)пирен является промежуточным веществом в процессе сажеобразования / C(c) / в дымовых газах. Показано, что увеличение отношения Н/С привело к уменьшению интенсивности образования конденсированного углерода (сажи, z=0) и ацетилена, и тем самым бенз(а)пирена в газовой фазе.

**Ключевые слова:** бенз(а)пирен, вода, кислород, газовая фаза, система, моделирование, расчет, оборудование, эксперимент.

## **DESTRUCTION OF BENZO(A)PYRENE IN A WATER-OXYGEN ENVIRONMENT AND PREDICTING THE FORMATION OF LOW MOLECULAR WEIGHT COMPONENTS AND PARTICLES IN THE GAS PHASE**

*Sambaeva Damira Asanakunovna, Corr. IA KR, Dr., Prof, Institute of Mining and Mining Technologies named after academician U.Asanaliyev of KSTU named after I.Razzakov, Kyrgyzstan, 720001, Bishkek, Chui avenue, 215, e-mail: [d.sambaeva@gmail.com](mailto:d.sambaeva@gmail.com) ORCID 0000-0002-9834-341X*

*Kemelov Kubat Amaturovich, Junior Researcher, Kyrgyz-Turkish Manas University, Kyrgyzstan, 720038, Bishkek, Djal, e-mail: [kubat.space@mail.ru](mailto:kubat.space@mail.ru) ORCID 0000-0001-7375-6325*

*Maymekov Zarlyk Kaparovich, Academician of IA KR, Dr., Prof, Kyrgyz-Turkish Manas University, Kyrgyzstan, 720038, Bishkek, Djal, e-mail: [z.maymekov@mail.ru](mailto:z.maymekov@mail.ru) ORCID 0000-0002-9117-262X*

*Moldobaev Mirlan Bolotbekovich, Junior Researcher, Kyrgyz-Turkish Manas University, Kyrgyzstan, 720038, Bishkek, Djal, e-mail: [mika2004.85@mail.ru](mailto:mika2004.85@mail.ru) ORCID 0000-0002-8710-5643*

*Sulaymanova Ayzhamal Zhalilovna, student, Institute of Mining and Mining Technologies named after academician U.Asanaliyev of KSTU named after I.Razzakov, Kyrgyzstan, 720001, Bishkek, Chui avenue, 215, e-mail: [aizhamalsulaimanova@gmail.com](mailto:aizhamalsulaimanova@gmail.com)*

**Abstract.** The following systems were studied: benzo (a) pyrene-oxygen, benzo(a)pyrene-water, benzo(a)pyrene-water-oxygen at the maximum entropy of the system. It was noted that experiments to determine the concentration of benzo(a)pyrene in the carbon black particles of the gas phase were carried out on chromatographic equipment such as Agilent Technologies 7890A (GC), Agilent 1200 (HPLC - Agilent Technologie) and Waters 2690 Separation Module (Waters Alliance). The experiments also used a fluorimetric detector "RF 551" (Shimadzu). The data were collected and

processed on the based of the Chemstation software and hardware complex. Based on the chromatogram of standard BP samples, a calibration curve was constructed depending on the concentration of benzo (a) pyrene on the peak area. Equilibrium compositions and concentrations of components, particles and their distribution in the gas phase ( $O$ ,  $O_2$ ,  $H$ ,  $H_2$ ,  $OH$ ,  $HO_2$ ,  $H_2O$ ,  $C$ ,  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $CH$ ,  $CH_2$ ,  $CH_3$ ,  $CH_4$ ,  $C_2H_4$ ,  $C_2H_6$ ,  $C_3H$ ,  $CHO$ ,  $CH_2O$ ,  $CH_2O_2$ ,  $CH_3O$ ,  $C_2H_4O_2$ ,  $O_3$ ) at different temperatures ( $T=500-2500$  K) and ratios of gas-liquid flows. It is noted that benzo(a)pyrene is an intermediate in the process of soot formation / C (s) / in flue gases. It is shown that an increase in the H/C ratio led to a decrease in the intensity of formation of condensed carbon (soot,  $z=0$ ) and acetylene, and thereby benzo(a)pyrene in the gas phase.

**Keywords:** benzo(a)pyrene, water, oxygen, gas phase, system, simulation, calculation, equipment, experiment.

**Введение.** Бенз(а)пирен ( $C_{20}H_{12}$ ) относится очень к сильным канцерогенным веществам, обладает свойством биологической аккумуляции и оказывает мутагенное действие на компоненты окружающей среды. Предельнодопустимая концентрация (ПДК) бенз(а)пирена составляет: максимально-разовая  $0,001$  мг/м<sup>3</sup>, среднесуточная  $10^{-6}$  мг/м<sup>3</sup>, в рабочей зоне  $0,00015$  мг/м<sup>3</sup>, что и означает о его токсичности, даже при малых следовых концентрациях [1-6]. Обычно, в процессах горения углеводородного топлива (г, ж, т) бенз(а)пирен адсорбируется на сажевых частицах дымовых газов и постепенно рассеивается в окружающей природной среде. При этом основным определяющим параметром образования бенз(а)пирена и снижение его концентраций в газовой фазе является модифицирование состава исходной топливной смеси, уменьшение коэффициента избытка воздуха (альфа-фактор), создание развитой поверхности и гетерогенности фаз, а также оптимизация времени пребывания продуктов сгорания в газовой фазе [1, 2]. Исходя из этих положений целесообразно увеличить поверхность контакта взаимодействующих фаз в зоне горения топлива, принять меры по снижению концентраций токсичных продуктов сгорания, в том числе бенз(а)пирена в газовой фазе. С учетом изложенных выше обстоятельств изучение системы бенз(а)пирен-вода-кислород при различных соотношениях исходных компонентов и в широких интервалах изменения температуры, и снижения концентрации загрязняющих веществ, в том числе, бенз(а)пирена в дымовых газах является актуальной научной задачей.

**Методы и методика исследований.** Эксперименты по определению концентрации бензапирена в сажевых частицах газовой фазы проводились на хроматографических оборудовании типа «Agilent Technologies 7890A» (ГХ), «Agilent 1200» (HPLC - Agilent Technologie) и «Waters 2690 Separations Module» (Waters Alliance). В опытах также был использован флуориметрический детектор «RF 551» (Shimadzu). Сбор и обработка данных произведены на основе программно-аппаратного комплекса «Chemstation» [7, 8]. На основании хроматограммы стандартных проб БП построен градуировочный график в зависимости концентрации бенз(а)пирена от площади пика.

**Результаты и их обсуждение.** Осуществлено физико-химическое моделирование деструкции системы бенз(а)пирена в среде вода - кислород и рассчитаны концентрации углерод, водород, кислородсодержащих частиц в газовой фазе при максимуме энтропии системы [9], т.е. при установлении в ней полного равновесия. В качестве модельной смеси рассмотрены [10]:  $C_{20}H_{12} - O_2$ ,  $C_{20}H_{12} - H_2O$ ,  $C_{20}H_{12} - H_2O - O_2$  при различных соотношениях исходных компонентов ( $P=0,1$  МПа,  $T=500 - 2500$  К). Система  $C_{20}H_{12} - H_2O - O_2$  изучена при соотношениях потоков. Рассчитаны равновесные составы и концентрации компонентов, образующихся в газовой фазе (табл. 1, рис. 1). Конденсированная фаза /C (к),  $C_2H_2$  (к), табл. 1 / в системе  $C_{20}H_{12} - H_2O - O_2$  (1:10:1) отсутствует, т.е.  $z=0$ . Полученные результаты в системах:

Равновесные составы и концентрации компонентов и частиц (моль/кг), образующихся в системе:  $C_{20}H_{12} - H_2O - O_2$  (1:10:1),  $P=0,1$  МПа,  $T=500-2500$  К

Состав	Температура, К				
	500	1000	1500	2000	2500
O	1,93E-22	3,25E-18	2,17E-09	6,12E-05	0,028336
O <sub>2</sub>	1,93E-22	7,77E-18	5,23E-09	0,000153	0,068997
H	3,21E-20	5,07E-08	0,000364	0,032052	0,490398
H <sub>2</sub>	0,425259	9,06603	7,78161	7,06102	6,83598
OH	1,93E-22	4,83E-10	5,37E-05	0,018505	0,602263
HO <sub>2</sub>	1,93E-22	4,58E-21	3,61E-12	1,12E-07	5,28E-05
H <sub>2</sub> O	43,0343	39,1724	40,4571	41,1526	40,8565
H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	1,93E-22	4,22E-17	8,32E-11	1,29E-07	1,03E-05
C	1,93E-22	1,93E-22	1,26E-20	1,8E-15	2,3E-12
CO	0,000304	0,917209	2,20236	2,9167	3,37049
CO <sub>2</sub>	4,21556	5,68807	4,40314	3,6888	3,235
CH	1,93E-22	1,93E-22	3,09E-19	3,47E-15	9,75E-13
CH <sub>2</sub>	1,93E-22	4,21E-20	1,49E-15	2,21E-13	4,6E-12
CH <sub>3</sub>	1,73E-18	2,28E-11	3,79E-11	3,88E-11	4,16E-11
CH <sub>4</sub>	2,38964	0,000222	3,85E-08	4,27E-10	3,27E-11
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	8,99E-13	2,14E-12	5,18E-16	5,6E-18	4,21E-19
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	5,19E-07	9,65E-13	6,4E-19	3,67E-22	1,93E-22
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	1,21E-12	1,49E-20	1,93E-22	1,93E-22	1,93E-22
CHO	1,93E-22	2,65E-11	2,38E-08	6,08E-07	4,23E-06
CHO <sub>2</sub>	1,81E-21	2,33E-11	2,08E-08	5,83E-07	4,25E-06
CH <sub>2</sub> O	2,36E-12	8,6E-08	1,41E-07	1,56E-07	1,7E-07
CH <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	8,34E-09	7,96E-07	8,26E-07	8,31E-07	8,56E-07
CH <sub>3</sub> O	1,93E-22	1,94E-17	3,37E-15	3,9E-14	1,79E-13
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	2,71E-11	2,53E-13	1,83E-16	4,22E-18	4,72E-19
O <sub>3</sub>	1,93E-22	1,93E-22	1,93E-22	5,59E-18	1,61E-12

$C_{20}H_{12}-H_2O-O_2$  (1:10:1) при  $P=0,1$  МПа,  $T=500-2500$  К показали образование низкомолекулярных компонентов и частиц типа: O, O<sub>2</sub>, H, H<sub>2</sub>, OH, HO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, H<sub>2</sub>O, C, CO, CO<sub>2</sub>, CH, CH<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub>, CH<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>, CHO, CHO<sub>2</sub>, CH<sub>2</sub>O, CH<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub>O, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>O<sub>2</sub>, O<sub>3</sub>. Включение воды в систему  $C_{20}H_{12}-O_2$  показало радикальное уменьшение конденсированного углерода (C<sub>c</sub>) и ацетилена в газовой фазе (рис. 1): C(c)=13,5602 моль/кг при 500 К; а при 2000 К, C(c)=1E-30 моль/кг; а увеличение воды в системе  $C_{20}H_{12}-H_2O-O_2$ , практически исключено образование (C<sub>c</sub>) и C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> (рис. 1), кроме того, наблюдается уменьшение метана в газовой фазе. Рассматривая бенз(а)пирен, как один из этапов образования сажи можно отметить, что ароматические углеводороды в процессе горения превращаются в сажу / C(c) / посредством прямой конденсации. Здесь важную роль играет ацетилен (C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> = 4,05E-22 моль/кг при 500 К; 6,16E-09, 1000 К; 3,77E-10, 1500 К; 1,03E-10, 2000 К; 5,04E-11, 2500 К), как один из основных элементов, входящих в кинетические схемы синтеза ароматических углеводородов.

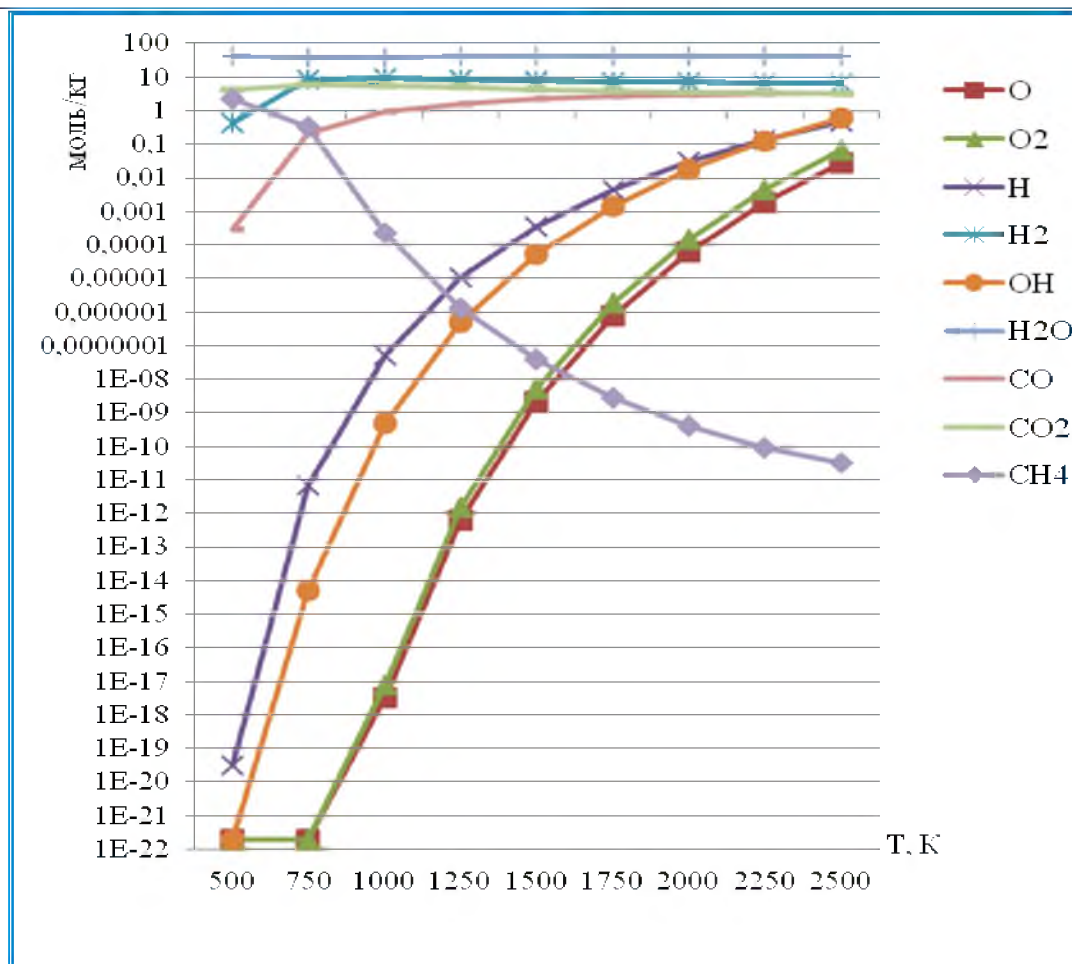


Рис. 2. Концентрационное распределение компонентов и частиц в системе  $C_{20}H_{12}-H_2O-O_2$  (1:10:1)

Поэтому среди алифатических углеводородов сжигание ацетилена дает повышенный выход бенз(а)пирена, отличающийся от общей тенденции, определяемой отношением Н/С в топливе [1, 2]. В случае использования водотопливных эмульсий основным определяющим параметром является состав смеси, который характеризуется коэффициентом избытка воздуха ( $\alpha$ ) в процессе горения топлива и количеством воды (10 - 15%) в топливе. При  $\alpha > 0,6$  концентрация бенз(а)пирена в продуктах сгорания не превышает уровня фона.

Таким образом, увеличение количества воды в системе  $C_{20}H_{12}-H_2O-O_2$  показали, что в газовой фазе конденсированный углерод (сажа) и ацетилен не образуются. Соответственно бенз(а)пирен в газовой фазе содержится в следовых количествах, т.е. практически отсутствует. В процессе минимизации концентрации бенз(а)пирена в сажевых частицах дымовых газов, определяющим параметром явилось увеличение соотношений водорода к углероду (Н/С, масс.%), которое приводит к уменьшению интенсивности сажеобразования и соответственно снижению концентрации бенз(а)пирена в газовой фазе.

#### Выводы:

1. Изучены системы: бенз(а)пирен-кислород, бенз(а)пирен-вода, бенз(а)пирен-вода-кислород при максимуме энтропии системы. Установлены равновесные составы и концентрации компонентов, частиц и их распределение в газовой фазе при различных температурах ( $T=500-2500$  К) и соотношениях газожидкостных потоков. Отмечено, что бенз(а)пирен является промежуточным веществом в процессе сажеобразования / С(с) / в дымовых газах.

2. Физико-химическое моделирование процесса деструкции гетерогенной сложной системы бенз(а)пирен-вода-кислород /  $C_{20}H_{12}-H_2O-O_2$  (1:10:1) / показало, что увеличение отношения Н/С привело к уменьшению интенсивности образования конденсированного углерода (сажи,  $z=0$ ) и ацетилена, и тем самым бенз(а)пирена в газовой фазе.

### **Список литературы**

1. Лукачев С. В. Образование и выгорание бенз(а)пирена при сжигании углеводородных топлив / С. В. Лукачев, А. А. Горбатко, С. Г. Матвеев. - М.: Машиностроение, 1999. - 150 с.

2. Лавров Н. В. О механизме образования бенз(а)пирена / Н. В. Лавров, Н. Л. Стасевич, Г. М. Комина // Докл. АН СССР, 1972. - Т.206. - № 6. - С. 1363 - 1366.

2. Шандала М. Г. Опыт и перспективы исследования химических канцерогенов в окружающей среде / М. Г. Шандала, Н. Я. Янышева, И. С. Киреева // Гигиена и санитария, 1985. - № 6. - С. 7 - 10.

3. Шабад Л. М. Бластомогенная опасность химических загрязнений среды обитания человека / Л. М. Шабад // Итоги науки и техники. Сер. Токсикология. М: ВИНТИ, 1978. - Т.9. - С.7-58.

4. Шабад, Л. М. О циркуляции канцерогенов в окружающей среде / Л. М. Шабад. -М.: Медицина, 1973. - 367 с.

5. Ахмедов Р. Б. Технология сжигания горючих газов и жидких топлив / Р. Б. Ахмедов, Л. М. Цирульников // Л.: Недра, 1984. - 238 с.

6. Беджер Г. М. Химические основы канцерогенной активности / Г. М. Беджер. - М.: Медицина, 1966. - 124 с.

7. Лейте В. Определение загрязнений воздуха в атмосфере и на рабочем месте / В. Лейте // Москва, 1970. - С.53-65.

8. Kemelov K.A. Physico-chemical basis of thermal destruction of benz(a)pyrene and reducing their concentration in gas phase / K. Kemelov, Z. Maymekov, D. Sambaeva // Waset' (World Academy of Science, Engineering and Technology). - Berlin, 2015. - P. 753 - 757.

9. Применение ЭВМ для термодинамических расчетов металлургических процессов [Синярев Г.Б., Ватолин Н.А., Трусов Б.Г. и др.]. - М.: Наука, 1982. - 264 с.

10. Кемелов, К.А. Окисление бенз(а)пирена в среде кислорода и энергетические параметры процесса / З.К. Маймеков, Д.А. Самбаева, К.А. Кемелов, М.Б. Молдобаев // Вестник КГУСТА. - Бишкек, 2013. - Вып.3(41). - С.129 - 133.