

УДК 371.315.7 (575.2) (04)

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛАЗМЕННОГО РАЗЛОЖЕНИЯ ЗАРИНА

*Г.А. Десятков* – докт. физ.-мат. наук, проф.

*Е.В. Трофименко* – преподаватель

*В.С. Энгельшт* – докт. физ.-мат. наук, проф.

---

Computer modeling processes of plasma decomposition of poison gas sarin was carried out at high pressure (0.1–1000 MPa) and influence of the oxide calcium addition on structure of reaction products. Results of the research have shown that the pyrolysis of sarin with the oxide calcium addition at pressure, higher than 150 MPa is an ecologically clean process and reaction products do not contain dangerous compositions.

В настоящее время во всем мире актуальной является проблема уничтожения химических отравляющих веществ. В данной работе представлены результаты компьютерного анализа процесса плазмохимического разложения одного из распространенных отравляющих веществ – зарина ( $C_4H_{10}PO_2F$ ). При этом внимание уделяется возможности получения в результате разложения не только безопасных для человека и окружающей среды химических соединений, но и технологически полезных веществ.

Традиционным является химический способ переработки зарина, в результате которого получаются нетоксичные продукты, однако он требует громоздкого оборудования и дорогих катализаторов. Плазменная технология переработки основана на использовании источников низкотемпературной плазмы, которые обеспечивают высокую концентрацию энергии в малом объеме, высокую температуру протекания процесса (несколько тысяч градусов), сопровождающегося плазмохимическими реакциями, которые не могут быть реализованы в обычных химических реакциях. При этом процесс переработки может быть реализован на базе более простого и компактного оборудования.

Проблема заключается в определении эффективных и экономически выгодных способов реализации плазмохимических процессов. В данной работе проведено компьютерное моделирование плазмохимического пиролиза (разложения) зарина с помощью программного комплекса ASTRA-4/pc<sup>1</sup>, алгоритм которого включает термодинамический метод определения характеристик равновесия произвольных гетерогенных систем, основанный на принципе максимума энтропии.

Анализ влияния состоял из трех этапов:

- 1) вариации состава атмосферы (аргон, кислород, воздух) на продукты переработки;
- 2) высокого давления на состав продуктов реакции;
- 3) добавки CaO на конечные продукты.

Расчеты проводились при нагреве зарина до температуры 2000 К, при которой эффективно протекает процесс его разложения, и давлении от 0,1 до 1000 МПа.

**Исследование влияния состава атмосферы при давлении 0,1 МПа.** В состав про-

---

<sup>1</sup> *Трусов Б.Г.* Моделирование химических и фазовых равновесий при высоких температурах (ASTRA-4/pc) – М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 1994. – 50 с.

дуктов пиролиза зарина в аргоне и температуре 2000 К (рис. 1) входят опасные для человека и окружающей среды соединения CO и P<sub>2</sub>. Поэтому проводить закалку при 2000 К экологически опасно. При медленном остывании продуктов пиролиза в реакторе от 2000 до 300 К получают следующие соединения: k\*P<sub>4</sub>O<sub>10</sub>, POF<sub>3</sub>, k\*C, CH<sub>4</sub>, где k\* – конденсированное состояние вещества. Из полученных соединений экологически опасным является газообразный трифтор оксид фосфора (POF<sub>3</sub>), концентрация которого составляет 1,4 моль/кг зарина и PF<sub>3</sub> с концентрацией 0,008 моль/кг зарина.

При пиролизе зарина в кислороде подбирается такое количество кислорода, чтобы его не

было в избытке при протекании реакции. В состав продуктов пиролиза при 2000 К (рис. 2) входит опасное для окружающей среды соединение дифосфора (P<sub>2</sub>). При медленном охлаждении от 2000 до 300 К, например, при введении в трубу холодного кислорода при комнатной температуре образуются следующие соединения: k\*C, CH<sub>4</sub>, k\*N<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>, HF, H<sub>2</sub>F<sub>2</sub>, POF<sub>3</sub>, PF<sub>5</sub>. Последние два соединения имеют концентрацию 0,038 и 0,02 моль/кг соответственно и являются опасными соединениями для окружающей среды. Для их нейтрализации нужно будет проводить дополнительные методы очистки.

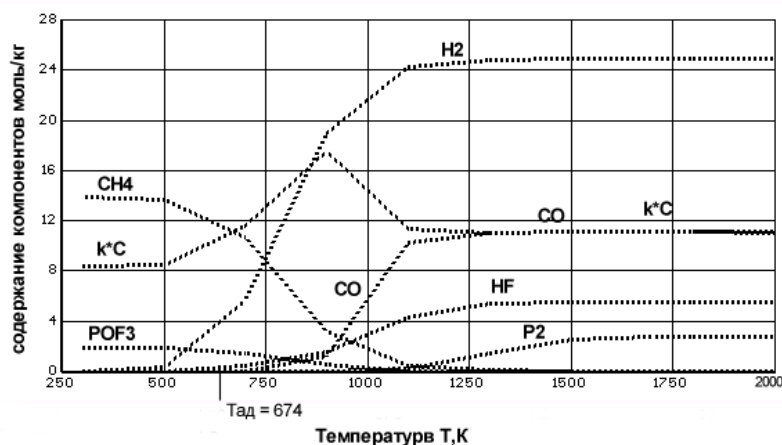


Рис. 1. Содержание компонентов в зависимости от температуры при пиролизе зарина в аргоне.

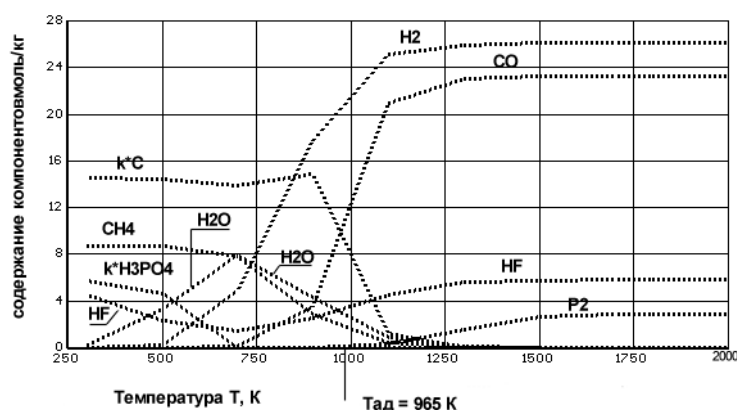


Рис. 2. Содержание компонентов в зависимости от температуры при пиролизе зарина в кислороде.

При пиролизе зарина в воздухе процент воздуха рассчитывался по процентному содержанию кислорода. При температуре 2000 К (рис. 3) в реакторе образуются опасные для окружающей среды соединения CO и P<sub>2</sub>, находящиеся в газообразном состоянии. При медленном остывании смеси от 2000 до 300К на выходе из реактора получаем следующие соединения: k\*H<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>, \*NH<sub>4</sub>F, k\*C, CH<sub>4</sub>, N<sub>2</sub>, Ar. В данных соединениях ортофосфорная кислота (k\*H<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>) и нитрид тетрагидрид фтора (k\*NH<sub>4</sub>F) находятся в конденсированном состоянии и не являются опасными для атмосферы. В продуктах пиролиза при 300К также присутствует соединение амиака (NH<sub>3</sub>) в газообразном состоянии с концентрацией 0,00065 моль/кг, которая превышает предельно допустимую концентрацию 20мг/м<sup>3</sup>.

**Исследование влияния высокого давления.** В составе продуктов реакции разложения зарина при температуре 2000 К в диапазоне давления от 0,1 до 1000 МПа наблюдается образование опасных для человека и окружающей среды соединений трифтор фосфора (PF<sub>3</sub>), а также тетрафосфора (P<sub>4</sub>) и дифосфора (P<sub>2</sub>). При этом содержание P<sub>4</sub>, PF<sub>3</sub> увеличивается с повышением давления, а P<sub>2</sub> – уменьшается.

Состав продуктов при их охлаждении до температуры 300 К приведен на рис.4. Ортофосфорная кислота (H<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>) и соединение P<sub>4</sub>O<sub>10</sub> находятся в конденсированном состоянии и не представляют опасности для окружающей среды. Однако в результате реакций образуются опасные трифтор оксид фосфора (POF<sub>3</sub>) и трифтор фосфора (PF<sub>3</sub>).

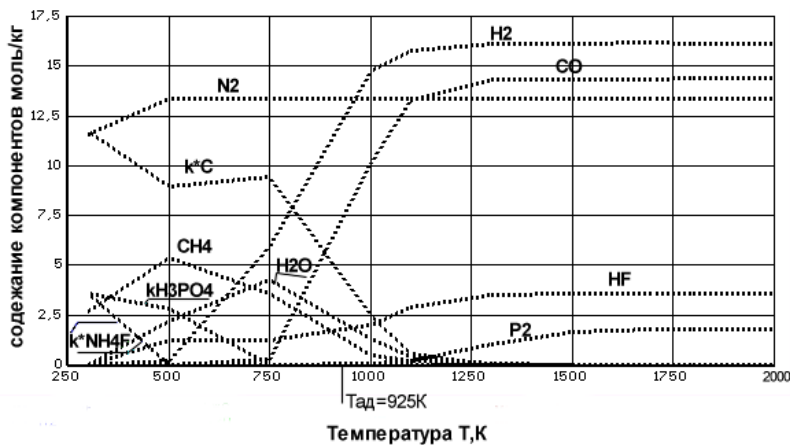


Рис. 3. Содержание компонентов в зависимости от температуры при пиролизе зарина в воздухе.

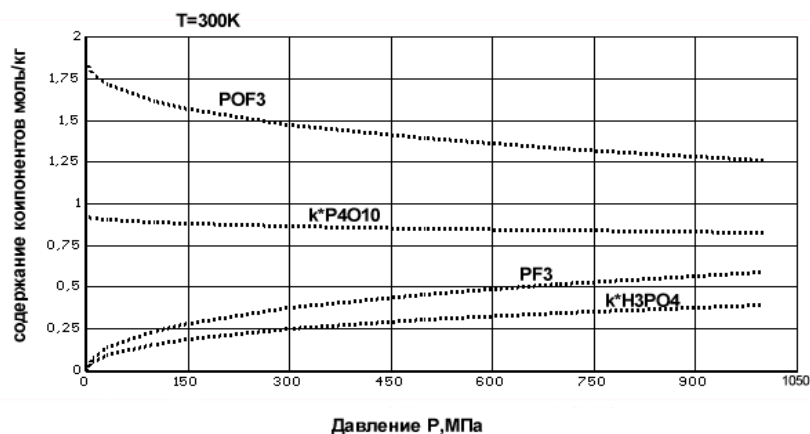


Рис. 4. Содержание компонентов в зависимости от давления при 300 К.

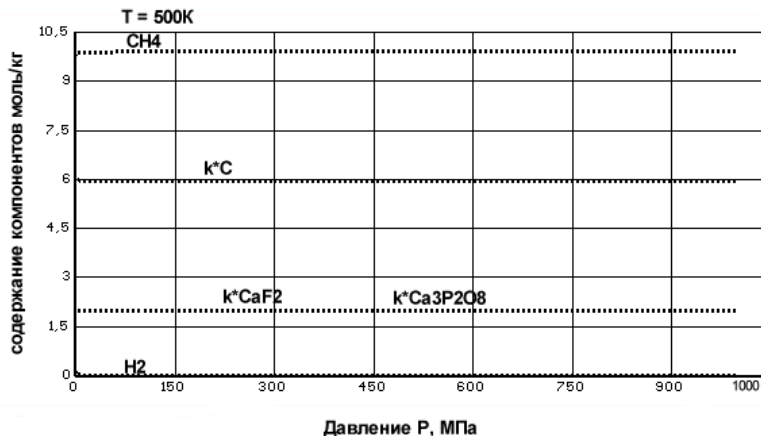


Рис.5. Зависимость концентрации компонентов разложения зарины от давления при добавлении CaO.

**Анализ влияния добавки CaO на конечные продукты.** Известен метод обезвреживания галогеносодержащих соединений путем химического взаимодействия с окисью кальция. В работе проведен анализ процесса разложения зарины с добавлением CaO. В составе продуктов реакции при 2000 К опасными газообразными соединениями являются оксид углерода (CO), дифосфор (P<sub>2</sub>); остальные компоненты, которые могли представлять опасность, связываются кальцием.

При медленном охлаждении смеси до 500 К (рис.5) продуктами реакции являются неопасные для окружающей среды соединения (k\*C, CH<sub>4</sub>, k\*CaF<sub>2</sub>, k\*Ca<sub>3</sub>P<sub>2</sub>O<sub>8</sub>), концентрация которых постоянна во всем интервале давлений.

#### Выводы

1. Переработка зарины при атмосферном давлении и вариации состава атмосфер (аргон, кислород, воздух) не является экологически безопасной для окружающей среды, так как продукты пиролиза при 300 К содержат опасные для человека и природы газы

POF<sub>3</sub>, PF<sub>5</sub>, PF<sub>3</sub> и аммиак (NH<sub>3</sub>). Закалка продуктов реакции при 2000 К тоже не дает положительных результатов, продукты содержат опасные газы CO и P<sub>2</sub>. Для нейтрализации опасных продуктов реакции потребуются дополнительные методы очистки, время и экономические затраты.

2. Переработка зарины при повышенном давлении до 1000 МПа не безопасна для окружающей среды, так как при остывании газа от 2000 до 300 К смесь содержит экологически опасные газообразные соединения фосфора PF<sub>3</sub>, POF<sub>3</sub>. Закалка газа при 2000 К тоже не является экологически безопасной, продукты пиролиза содержат опасные газообразные соединения CO, PF<sub>3</sub>, POF<sub>3</sub>.
3. Переработка зарины при добавлении мелкодисперсного порошка оксида кальция при давлении от 150 до 1000 МПа является экологически безопасной. Продукты реакции при 500 К – безопасные конденсированные соединения и газы, не требующие дополнительной очистки.