

ИССЛЕДОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ ХРИЗЕНИЛА ИЗ 2-ФЕНАНТРИЛА ПОСРЕДСТВОМ НАСА-МЕХАНИЗМА

Воробьев П.М., Савченкова А.С., Самарский университет, г. Самара

Мебель А.М., Florida International University, Miami

Чечет И.В., Матвеев С.Г., Самарский университет, г. Самара

2

Ключевые слова: ПАУ, 2-фенантрин, хризенил, квантово-химический расчет, НАСА механизм

Актуальность исследования образования и роста молекул полициклических ароматических углеводородов (ПАУ) в условиях горения топлив в промышленных установках и транспорте обусловлена проблемой загрязнения окружающей среды, поскольку ПАУ накапливаются в воздухе, воде и почве, и многие из них обладают мутагенной и канцерогенной активностью.

Для прогнозирования образования вредных выбросов, необходимо составить детальный кинетический механизм, включающий в себя все возможные реакции роста ПАУ. Изучать механизм роста молекул ПАУ эмпирически затруднительно в связи с многообразием и сложностью процессов, протекающих в условиях горения, трудоемкостью постановки эксперимента и финансовыми затратами. В связи с этим на передний план выходят теоретические методы исследования.

В работах [1,2] были подробно изучены механизмы образования молекул от бензола до трехкольцевых ароматических соединений по одному из приоритетных механизмов образования ПАУ «H abstraction C₂H₂ addition» (НАСА), разработанному М. Фрэнкляхом [3]. Предполагается, что рост ПАУ от трехкольцевой до четырехкольцевой структуры согласно НАСА механизму пройдет по аналогичному пути. Целью данного исследования является изучение механизма реакции получения хризенила из фенантрила-2 по НАСА механизму с помощью квантово-химических расчетов, на основе которых будут получены константы скоростей данного взаимодействия, используемые в кинетическом моделировании.

Расчет геометрий и частот исходных веществ, интермедиатов, переходных состояний и продуктов реакций проводился с помощью программного пакета Gaussian с использованием метода B3LYP и базиса 6-311G**. Уточнение энергий проводилось в программном пакете Molpro методом G3(MP2, CC). Были рассмотрены основные и второстепенные каналы реакций. Расчет констант

скоростей реакций проводился посредством программного пакета MESS методом RRKM в диапазоне температур 300-3000 К и давления 0,01 – 100 атм.

В результате проведенного исследования построены поверхности потенциальной энергии взаимодействия 2-фенантрила с ацетиленом и 2-этинилфенантрила с ацетиленом, рассчитаны константы скоростей реакций в широких диапазонах температур и давлений, показано, что наиболее вероятным продуктом согласно НАСА механизму является хризенил.

Список литературы

1. Mebel A. M., Georgievskii Y., Jasper A. W., Klippenstein S. J. Temperature- and pressure-dependent rate coefficients for the НАСА pathways from benzene to naphthalene. // Proceedings of Combustion Institute Vol.36, pp. 919-926 (2017).
2. Kislov V.V., Sadovnikov A.I., Mebel A.M. Formation mechanism of polycyclic aromatic hydrocarbonsb the second aromatic ring // J. Phys. Chem. A, Vol. 117, No. 23, pp. 4794-4816 (2013).
3. M. Frenklach , D.W. Clary , W.C. Gardiner , S.E. Stein , Proc. Comb. Inst. No.20, pp. 887–901 (1984).

УДК 621.45

РЕАКЦИЯ 1-ПРОПИНИЛА С БЕНЗОЛОМ В УСЛОВИЯХ ГОРЕНИЯ

Галимова Г.Р., Самарский университет, г. Самара, Международный университет Флориды, г. Майами

Красноухов В.С., Самарский университет, г. Самара

Аязов В.Н., Самарский университет, г. Самара, Физический институт имени П.Н. Лебедева РАН, г. Самара

Мебель А.М., Самарский университет, г. Самара, Международный университет Флориды, г. Майами

Ключевые слова: 1-пропинил, бензол, горение, ПАУ (полициклические ароматические углеводороды), ППЭ (поверхность потенциальной энергии), сажа, ab initio

Одним из основных вредных веществ, образующихся при сжигании углеводородного топлива, являются частицы сажи, представляющие собой в основном агрегаты соединений углерода: графен, фуллерен, графит, и т.д.,