

З.К. Маймеков, Д.А.Самбаева, Ж.Д.Темиргалиева
 Кыргызско-Турецкий университет «Манас»,
 Кыргызский институт минерального сырья при КГТУ им. И. Раззакова

КОНВЕРСИЯ 1,2-ПРОПАДИЕНА В ПАРОГАЗОВОЙ СРЕДЕ И УМЕНЬШЕНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ ДИОКСИДА УГЛЕРОДА В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ

Изучено газо-жидкостное окисление 1,2-пропадиена и рассчитаны равновесные составы и концентрации компонентов, образующихся в системе $C_3H_4-O_2-H_2O$ при различных соотношениях воды.

В работе осуществлено физико-химическое моделирование базовых элементов топливных систем, т.е. углеводородов нефти, состоящей из представителей алканов (C_nH_{2n+2}), нафтенов (C_nH_{2n} , C_nH_{2n-2} , C_nH_{2n4}), аренов (C_nH_{2n6}), и получены научные результаты, позволяющие оценить термодинамические параметры и равновесные концентрации оксидов углерода (II, IV) в газовой фазе [1]. В качестве модельной смеси в данном случае нами были выбраны только нафтены на базе 1,2-пропадиена. Конверсия 1,2-пропадиена водой осуществлена в среде чистого кислорода при $P=0,1$ МПа и $T=500-2500$ К с целью достижения полного выгорания компонентов системы. При этом рассчитаны равновесные составы и концентрации активных частиц, образующихся в системе $C_3H_4-O_2-H_2O$ при различных соотношениях воды (табл. 1 и 2). Из таблицы видно, что в равновесных условиях имеют место образование атомарных частиц, радикалов и молекул газовой и конденсированных фаз.

Концентрационное распределение основных компонентов в газовой фазе имеет следующий спектр (рис. 1): концентрация водорода в системе $C_3H_4-O_2-H_2O$ (1:1:1) при 500 К составила 0,288947 моль/кг; 1000 К – 26,5538; 1500 К – 24,385; 2000 К – 23,2299; 2500 К – 22,3753 моль/кг; в $C_3H_4-O_2-H_2O$ (1:1:5) при 500 К составила 0,420627 моль/кг; 1000 К – 16,6106; 1500 К – 13,9744; 2000 К – 12,793; 2500 К – 12,1324 моль/кг. Концентрация H_2O в газовой фазе в системе $C_3H_4-O_2-H_2O$ (1:1:1) при 500 К составила 23,7263 моль/кг; 1000 К – 7,66411; 1500 К – 10,7573; 2000 К – 11,8808; 2500 К – 12,2515 моль/кг; в $C_3H_4-O_2-H_2O$ (1:1:5) при 500 К составила 36,7721 моль/кг; 1000 К – 30,1594; 1500 К – 32,8058; 2000 К – 33,9595; 2500 К – 34,1208 моль/кг. Концентрация метана при 500 К равна 5,56371 (1:1:1) моль/кг, а 4,79383 при (1:1:5); 1000 К – 0,462403 (1:1:1); 0,005221 (1:1:5); 1500-2500 К – в следовых количествах. Концентрация оксида углерода в системе $C_3H_4-O_2-H_2O$ (1:1:1) при 500 К составила 0,000693 моль/кг; 1000 К – 17,3217; 1500 К – 5,62187; 2000 К – 22,4663; 2500 К – 22,9423 моль/кг; в $C_3H_2-O_2-H_2O$ (1:1:5) при 500 К составила 0,000492 моль/кг; 1000 К – 2,96501; 1500 К – 5,5499; 2000 К – 6,78727; 2500 К – 7,3689 моль/кг; при пятикратном увеличении содержания воды концентрация CO в газовой фазе уменьшается. Концентрация диоксида углерода в системе $C_3H_4-O_2-H_2O$ (1:1:1) при 500 К составила 7,80501 моль/кг; 1000 К – 7,17562; 1500 К – 3,62006; 2000 К – 2,49341; 2500 К – 2,01734 моль/кг; в $C_3H_4-O_2-H_2O$ (1:1:5) при 500 К составила 5,90269 моль/кг; 1000 К - 7,72678; 1500 К - 5,07514; 2000 К - 3,90974; 2500 К - 3,32809 моль/кг.

Равновесные составы и концентрации компонентов (моль/кг), образующихся в системе: $C_3H_4-O_2-H_2O$ (1:1:1) при $P=0,1$ МПа, $T=500-2500$ К

Таблица 1

Состав	Температура, К				
	500	1000	1500	2000	2500
			0	0	

<u>C₃H₄-O₂-H₂O (1:1:1):</u>					
O	1,93E-22	2,34E-19	2,02E-10	5,89E-06	0,002836
O ₂	1,93E-22	3,74E-20	4,13E-11	1,29E-06	0,000633
H	2,29E-20	9,01E-08	0,000675	0,060862	0,927357
H ₂	0,288947	26,5538	24,385	23,2299	22,3753
OH	1,93E-22	5,74E-11	8,45E-06	0,003084	0,104339
HO ₂	1,93E-22	1,93E-22	4,81E-14	1,63E-09	8,37E-07
H ₂ O	23,7263	7,66411	10,7573	11,8808	12,2515
H ₂ O ₂	1,93E-22	5,51E-19	1,88E-12	3,27E-09	2,83E-07
C(c)	11,5903	1E-30	1E-30	1E-30	5,75E-29
C	1,93E-22	1,93E-22	1,44E-18	1,58E-13	1,71E-10
CO	0,000693	17,3217	21,3396	22,4663	22,9423
CO ₂	7,80501	7,17562	3,62006	2,49341	2,01734
C ₂ O	1,93E-22	3,72E-19	1,77E-14	3,94E-12	1,05E-10
C ₃ O ₂	1,93E-22	2,39E-13	1,93E-13	1,74E-13	1,71E-13
CH	1,93E-22	1,93E-22	5,96E-17	5,28E-13	1,25E-10
CH ₂	1,93E-22	3,23E-17	4,87E-13	5,83E-11	1,02E-09
CH ₃	4,22E-18	2,88E-08	2,09E-08	1,77E-08	1,6E-08
CH ₄	5,56371	0,462403	3,59E-05	3,38E-07	2,18E-08
C ₂ H	1,93E-22	7,57E-21	1,64E-16	2,54E-14	5,52E-13
C ₂ H ₂	5,72E-22	5,45E-09	4,6E-10	1,41E-10	7,3E-11
C ₂ H ₃	1,93E-22	4,99E-13	1,02E-13	4,8E-14	3,15E-14
C ₂ H ₄	7,88E-12	1,17E-06	5,04E-11	3,55E-13	1,91E-14
C ₂ H ₅	1,95E-20	1,02E-11	2,94E-15	5,36E-17	5,08E-18
C ₂ H ₆	4,14E-06	1,43E-06	1,78E-13	6,98E-17	6,75E-19
C ₃ H ₈	3,3E-11	1,57E-11	2,36E-21	1,93E-22	1,93E-22
CHO	1,93E-22	8,25E-10	3,9E-07	8,12E-06	4,98E-05
CHO ₂	3,19E-21	4,84E-11	2,89E-08	6,82E-07	4,59E-06
CH ₂ O	4,9E-12	4,41E-06	3,91E-06	3,61E-06	3,47E-06
CH ₂ O ₂	1,41E-08	2,73E-06	1,94E-06	1,69E-06	1,6E-06
CH ₃ O	1,93E-22	1,64E-15	1,58E-13	1,56E-12	6,32E-12

Равновесные составы и концентрации компонентов (моль/кг), образующихся в системе: C₃H₄-O₂-H₂O (1:1:5) при P=0,1 МПа, T=500-2500 К

Таблица 2

Состав	Температура, К				
	500	1000	1500	2000	2500
<u>C₃H₄-O₂-H₂O (1:1:5):</u>					
O	1,93E-22	1,43E-18	1,03E-09	2,92E-05	0,013946
O ₂	1,93E-22	1,44E-18	1,12E-09	3,32E-05	0,015979
H	3,12E-20	7,02E-08	0,000499	0,044167	0,668137
H ₂	0,420627	16,6106	13,9744	12,793	12,1324
OH	1,93E-22	2,81E-10	3,33E-05	0,011614	0,386112
HO ₂	1,93E-22	1,12E-21	1,01E-12	3,19E-08	1,59E-05
H ₂ O	36,7721	30,1594	32,8058	33,9595	34,1208
H ₂ O ₂	1,93E-22	1,36E-17	3,05E-11	4,85E-08	4,05E-06
C	1,93E-22	1,93E-22	7,13E-20	9,19E-15	1,07E-11
CO	0,000492	2,96501	5,62187	6,78727	7,3689
CO ₂	5,90269	7,72678	5,07514	3,90974	3,32809
C ₂ O	1,93E-22	1,79E-21	2,42E-16	7,25E-14	2,21E-12
CH	1,93E-22	1,93E-22	2,28E-18	2,33E-14	5,9E-12
CH ₂	1,93E-22	5,66E-19	1,44E-14	1,96E-12	3,62E-11
CH ₃	3,41E-18	4,05E-10	4,81E-10	4,5E-10	4,28E-10
CH ₄	4,79383	0,005221	6,39E-07	6,52E-09	4,37E-10
C ₂ H ₂	2,26E-22	2,68E-12	7,07E-13	2,88E-13	1,69E-13
C ₂ H ₃	3,54E-12	3,7E-10	4,63E-14	4,17E-16	2,51E-17
C ₂ H ₄	2,11E-06	2,91E-10	9,81E-17	4,72E-20	5,01E-22
C ₂ H ₆	9,95E-12	5,78E-17	1,93E-22	1,93E-22	1,93E-22
CHO	1,93E-22	1,13E-10	7,96E-08	1,86E-06	0,000012
CHO ₂	2,57E-21	4,18E-11	3,13E-08	8,12E-07	5,7E-06
CH ₂ O	3,96E-12	4,86E-07	6,17E-07	6,28E-07	6,3E-07
CH ₂ O ₂	1,21E-08	1,89E-06	1,63E-06	1,52E-06	1,49E-06
CH ₃ O	1,93E-22	1,45E-16	1,93E-14	2,06E-13	8,66E-13
C ₂ H ₄ O ₂	7,96E-11	7,71E-12	3,33E-15	6,52E-17	6,22E-18

Изменение свойств системы: C₃H₄-O₂-H₂O (1:1:1) при P=0,1 МПа, T=500-2500 К, μ=57,80224 моль/кг, MMq=17,93738 г/моль, Rq=471,369 Дж/(кг·К), z=0

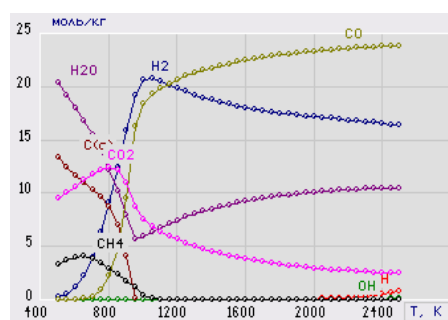
Таблица 3

Наименование параметров	$C_3H_4-O_2-H_2O$ (1:1:1), моль/кг: С – 24,960; Н – 70,285; О – 39,337				
	Температура, К				
	500	1000	1500	2000	2500
$V \cdot 10^2, м^3/кг$	155,415	492,024	749,573	999,957	1260,08
$S, кДж/(кг \cdot K)$	8,35497	12,9367	14,0234	14,7161	15,3598
$I, кДж/кг$	-8919,88	-5243,44	-3926,95	-2721,34	-1269,51
$U, кДж/кг$	-8982,62	-5588,77	-4527,53	-3572,23	-2379,32
$C'_p \cdot 10^4, кДж/(кг \cdot K)$	20627,1	53213,4	23658,4	25128,4	35933,5
$Mu \cdot 10^5, Па \cdot с$	1,92	3,75	4,96	6,03	7
$Lt' \cdot 10^5, Вт/(м \cdot K)$	24506,7	46781,5	23311	30052	74921
$Pr' \cdot 10^3$	156,494	427,065	502,986	503,8	335,738

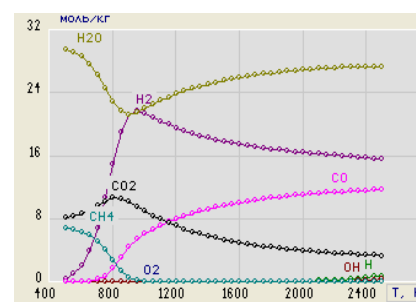
Изменение свойств системы: $C_3H_4-O_2-H_2O$ (1:1:5) при $P=0,1$ МПа, $T=500-2500$ К, $\mu = 55,67486$ моль/кг, $MMq = 18,0603$ г/моль, $Rq = 462,9006$ Дж/(кг·К), $z=0$

Таблица 4

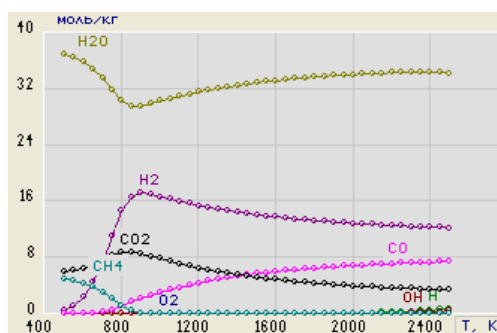
Наименование параметров	$C_3H_4-O_2-H_2O$ (1:1:5), моль/кг: С – 10,697; Н – 93,561; О – 48,578				
	Температура, К				
	500	1000	1500	2000	2500
$V \cdot 10^2, м^3/кг$	199,086	477,801	716,835	956,241	1206,3
$S, кДж/(кг \cdot K)$	10,3263	13,0959	14,1345	14,9035	15,6353
$I, кДж/кг$	-11227,6	-9208,63	-7927,23	-6588,22	-4936,16
$U, кДж/кг$	-11307,9	-9543,98	-8501,58	-7401,91	-5998,6
$C'_p \cdot 10^4, кДж/(кг \cdot K)$	21775,7	25656,6	25962,6	28099,5	42709,9
$Mu \cdot 10^5, Па \cdot с$	1,84	3,62	4,95	6,12	7,18
$Lt' \cdot 10^5, Вт/(м \cdot K)$	24378,2	15281,9	21609,5	28027,1	78084,3
$Pr' \cdot 10^3$	164,64	607,298	594,698	613,711	392,771



а)



б)



в)

Рис. 1. Равновесные составы и концентрации компонентов, образующихся в системе $C_3H_4-O_2-H_2O$: а) (1:1:1), б) (1:1:3), в) (1:1:5) при $P=0,1$ МПа

Таким образом, результаты исследований по конверсии отдельных фрагментов углеводородов нефти (C_xH_y), в частности 1,2-пропадиена при различных соотношениях воды в среде чистого кислорода показали, что концентрации оксидов углерода в газовой фазе уменьшаются (рис.1, табл.1 и 2). Данное положение подтверждено экспериментальными данными, полученными при сжигании водомазутных эмульсий в котлоагрегатах средней и малой мощности и тем самым явились базовой предпосылкой снижения содержания газовых выбросов в атмосферу[2].

Обозначения: удельный объем - V , м³/кг; энтропия - S , кДж/(кг·К); полная энтальпия - I , кДж/кг; полная внутренняя энергия - U , кДж/кг; число молей - μ , моль/кг; удельная теплоемкость (равновесная) - C_p' , кДж/(кг·К); молярная масса газовой фазы - M_{Mq} , г/моль; газовая постоянная - Rq , Дж/(кг·К); теплоемкость газовой фазы (равновесная) - $C_p'q$, кДж/(кг·К); коэффициент динамической вязкости - μ , Па·с; коэффициент теплопроводности - Lt , Вт/(м·К); полная теплопроводность - Lt' , Вт/(м·К); число Прандтля (равновесное) - Pr' ; массовая доля конденсированных фаз - z .

Литература

1. Синярев Г.Б., Ватолин Н.А., Трусов Б.Г., Моисеев Г.К. Применение ЭВМ для термодинамических расчетов металлургических процессов. - Москва: Наука, 1982.
2. Самбаева Д.А., Маймеков З.К. Ключевые вопросы экологии и охраны окружающей среды Кыргызстана //Вестник Исык-Кульского университета, Каракол, 2010 – № 26 - С. 247-251.