

# Etán pirolízis- és oxidációs modelljének vizsgálata nagy nyomású lökeshullámcső-kísérletek alapján

Samu Viktor, III. évf. Kémia BSc

ELTE TTK Kémiai Intézet, Fizikai Kémiai Tanszék

Témavezetők: **Turányi Tamás** egyetemi tanár  
ELTE Fizikai Kémiai Tanszék  
**Varga Tamás** PhD hallgató  
ELTE Fizikai Kémiai Tanszék

Etán nagy nyomáson lezajló égési folyamatait mindezidáig kevesen kutatták, holott fontos köztitermék tüzelőanyagok oxidációja és pirolízise során. Amennyiben bonyolultabb tüzelőanyagok égését szeretnénk szimulálni, úgy elkerülhetetlen, hogy előbb egy alkalmas mechanizmust készítsünk etán égési folyamatainak leírására is.

Tranter és munkatársai [1] etán pirolízisét és oxidációját vizsgálták széles hőmérséklet- és nyomástartományokon. A nagy nyomású lökeshullám-csőben 829–1491 K és 5–1000 bar körülmények között végzett kísérleteik során a legfontosabb végtermékek koncentrációit mérték. Céljük egy nagy nyomáson is jól működő etán pirolízis- és oxidációs modell megalkotása volt a mért adatok felhasználásával, de az általuk készített mechanizmus nem írta le kellően jól a mért eredményeket.

Munkám során az általuk mért adatsorok újraértékelését végeztem el az ELTE Kémiai Intézet Reakciókinetikai Laboratórium által kidolgozott optimalizációs módszer segítségével [2]. Kiindulási modellként a Healy és munkatársai által készített NUIG C5 v49 [3] modell redukált változatát használtam. Lokális érzékenységanalízis segítségével meghatároztam azt a kilenc reakciót, amelyek legnagyobb mértékben befolyásolják a szimulált végtermékkoncentrációkat a mérések körülményeinél. A kiválasztott reakciókra a szakirodalomban fellelhető közvetlen mérések és elméleti számítások alapján meghatároztam azok hőmérsékletfüggő bizonytalansági tartományait. Az optimalizálást a Reakciókinetikai Laboratórium által fejlesztett Optima programmal végeztem. Az optimalizációhoz a Tranter és munkatársai által mért adatsorokat, illetve szakirodalomból gyűjtött sebességi együttható-méréseket használtam fel.

Az optimalizációval kapott mechanizmus lényegesen jobban írta le a lökeshullámcső-kísérletek eredményeit mind a kiindulási, mind a Tranter és munkatársai által alkotott modellnél. Ezekon felül több elemi reakcióról is értékes információkat nyertem. A  $C_2H_6 + H = C_2H_5 + H_2$  és  $C_2H_4 + OH = C_2H_3 + H_2O$  reakciók sebességi együtthatóit sokkal pontosabban tudtam meghatározni, mint ahogy az a szakirodalomban korábban ismert volt. A kilenc kiválasztott reakcióból összesen hat esetében észlelhető javulás a kiindulási bizonytalanságokhoz képest a teljes hőmérséklettartományra. A többi reakció közül a szakirodalomban érdemben nem szereplő  $C_2H_3 + O_2 = CH_2CHO + O$  és  $C_2H_2 + O_2 = HCCO + OH$  reakciók sebességi együtthatóinak értékéről kaptam új, mindezidáig nem ismert értékeket az 1200–1500 K hőmérsékletintervallumban.

- [1] R.S. Tranter, A. Raman, R. Sivaramakrishnan, K. Brezinsky, *Int. J. Chem. Kinet.* 37, 306-331 (2005)  
[2] T. Turányi, T. Nagy, I.G. Zsély, M. Cserhádi, T. Varga, B.T. Szabó, I. Sedyó, P.T. Kiss, A. Zempléni, H.J. Curran, *Int. J. Chem. Kinet.* 44, 284–302 (2012)  
[3] D. Healy, D.M. Kalitan, C.J. Aul, E.L. Petersen, G. Bourque, H.J. Curran, *Energ. Fuel* 24, 1521–1528 (2010)