

Nitrogén-oxidok égéskémiáját leíró reakciómechanizmusok vizsgálata hidrogén égési rendszerekben

Kovács Márton, III. évf. vegyész

ELTE TTK Kémiai Intézet, Fizikai Kémiai Tanszék

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

Az égés a legfontosabb folyamat az emberiség számára. Számtalan példa van a hasznosítására, legyen szó ipari folyamatról, energiatermelésről, vagy valamilyen égésen alapuló berendezésről. Ahhoz, hogy ezek működését optimalizálni tudjuk, környezeti és gazdasági szempontból is a leghatékonyabbá tudjuk tenni, ismernünk kell az égési folyamat pontos lejárásdát.

A nitrogén-oxidok égési rendszerekben való viselkedésének tanulmányozása több szempontból is fontos feladat. A nitrogén-oxidok környezetbe jutásának sok káros hatása van, a NO és NO₂ savas esők kialakulásáért lehet felelős, az N₂O üvegházhatást kiváltó gáz, és felelős az ózonréteg bontásáért is. Ezért környezetvédelmi szempontból elengedhetetlen, hogy le tudjuk írni, hogy a különböző égési folyamatokban hogyan viselkednek a nitrogén-oxidok, és ez alapján például egy ipari folyamatban kézzel tudjuk tartani a környezetbe való kibocsátásukat. Egy másik fontos szempont a nitrogén-oxidok égési rendszerekben való viselkedésének tanulmányozása céljából az úgynevezett érzékenyítő hatásuk. Ez azt jelenti, hogy nitrogén-oxidokat égési rendszerekhez adva azok reaktivitása jelentős mértékben megnövekedhet, ami reakciókinetikai érdekessége mellett gyakorlati alkalmazások szempontjából is fontos.

Az égési rendszerek viselkedésének leírását összetett reakciómechanizmusok felépítésével lehet megtenni. Összegyűjtöttük a H₂/NO_x égési rendszert leíró mechanizmusokat. Összesen hét, többségében az elmúlt néhány évben közölt mechanizmust találtam. Munkám során a célom az volt, hogy megvizsgáljam ezeket a mechanizmusokat, és különböző szempontok alapján összehasonlítsam azokat, hogy melyikkel lehet a legjobban leírni a vizsgált rendszert.

Egy mechanizmus jóságát annak alapján lehet megmondani, hogy az általa számított szimulációs értékek mennyire egyeznek a kísérletekben mért adatokkal. A mechanizmusok tesztelését úgynevezett indirekt kísérleti eredményekre alapoztuk, melyek során az égési folyamat egészére kapunk információt. A H₂/NO_x égési rendszerek kísérleti vizsgálatát elsősorban kétféle berendezésben végezték. Lökéshullám-csőben mértek gyulladási időt, és csőreaktorban mértek koncentráció idő-profilokat illetve a kiáramló gáz koncentrációját. A munkám során összesen 1354 mérési adatpontot használtam fel, amelyeket 9 cikkben közöltek. A mechanizmusok vizsgálatát az összegyűjtött mérési adatsorokra az ELTE Kémiai Intézet Reakciókinetikai Laboratóriuma által fejlesztett Optima++ programmal végeztem.

Különböző körülmények mellett (hőmérséklet, nyomás, összetétel) megvizsgáltam a mechanizmusokat, és a mérési adatokkal való összehasonlítás által meg tudtam állapítani, hogy mikor melyik a legpontosabb. Fel tudtam állítani egy végső sorrendet is a vizsgált mechanizmusok között, az összes vizsgált körülmény alapján átfogóan a H₂/NO_x égési rendszerre.

Lokális érzékenységanalízis segítségével minden mérési körülménynél kiválasztottam azokat az elemi reakciókat, amelyek sebességi paramétereit pontosan kell ismerni ahhoz, hogy a mechanizmus jól írja le a kísérleti adatokat. Ezen reakciók sebességi paramétereinek pontosításával egy optimalizált, hatékonyabb reakciómechanizmust lehet majd csinálni a H₂/NO_x égési rendszerre.