

ПИСЬМА В РЕДАКЦИЮ

УДК 541.124.7:518.5

КИНЕТИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ ОКИСЛЕНИЯ ПРИРОДНОГО ГАЗА В ПРИСУТСТВИИ ДОБАВОК ПРОПАНА. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Методом математического моделирования осуществлен кинетический анализ реакционных моделей окисления природного газа – метана в присутствии добавок более легкоокисляющегося углеводорода – пропана. Анализ проводился с целью выявления эффективных путей переработки природного углеводородного сырья в ценные продукты путем прямого некаталитического окисления.

В основу взята кинетическая модель окисления метана, включающая 43 элементарных акта [1], разработанная на основе нового механизма [2, 3], базирующегося на прямых экспериментальных данных по свободным радикалам. Основная модель окисления метана (43 реакции) дополнена возможными элементарными реакциями с участием пропана. Процесс изучался в статических условиях. Анализ проводился для смесей $\text{CН}_4:\text{O}_2 = 1:2$, при различных добавках пропана (C_3H_8) при исходном давлении метан-кислородной смеси $P = 136 \text{ Торр}$ и при различных температурах, в изотермических и неизотермических условиях протекания процесса.

Полученные результаты показывают, что добавки пропана, как исследовало ожидать, оказывают эффективное иницирующее воздействие и, тем самым, позволяют понижать температуру осуществления процесса. При определенных добавках пропана (>5%) сокращается период индукции превращения метана. Вместе с тем при более высоких добавках пропана (35% и выше) наблюдается уменьшение превращения метана, очевидно, из-за существенного расхода кислорода на окисление пропана, который окисляется легче и расходуется быстрее в сопряженном окислительном процессе. В общей сложности добавки пропана позволяют осуществлять окисление метана при относительно пониженных температурах и в результате изменить соотношение метанол–формальдегид в пользу метанола. Так, если без добавок пропана при $T=400^\circ\text{C}$ процесс протекает очень медленно и на протяжении более чем 2 ч практически нет превращений, то в присутствии 5-15% пропана уже на начальных стадиях процесс протекает с измеримой глубиной превращения метана. Соотношение

метанол-формальдегид при этом возрастает, т.е. процесс протекает с его увеличением в пользу метанола.

Вторым важным выводом, вытекающим из результатов кинетического анализа, является то, что при неизотермическом протекании процесс начинается в режиме медленного окисления и ускоряется во времени с преимущественным образованием монооксида углерода и водорода (синтез газа).

Важно отметить, что предварительно полученные экспериментальные данные подтверждают результаты данного кинетического анализа и выдвигают необходимость проведения подробных исследований.

**ԲՆԱԿԱՆ ԳԱԶԻ ՕՔՍԻԴԱՑՄԱՆ ԿԻՆԵՏԻԿԱԿԱՆ
ԱՌԱՆՁՆԱՀԱՍԿՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԸ ՊՐՈՊԱՆԻ ՀԱՎԵԼՈՒՄՆԵՐԻ
ԱՌԿԱՅՈՒԹՅԱՆ ՊԱՅՄԱՆՆԵՐՈՒՄ: ՄԱԹԵՄԱԹԻԿԱԿԱՆ
ՄՈԴԵԼԱՎՈՐՈՒՄ**

Ա. Հ. ՄԱՆԹԱՇՅԱՆ և Է. Ռ. ՄԱՐԿԱՐՅԱՆ

Մաթեմատիկական մոդելավորման եղանակով իրականացվել է բնական գազի՝ մեթանի, օքսիդացման մեխանիզմի վերլուծությունը պրոպանի հավելումների առկայությամբ, տարբեր պայմաններում: Բացահայտված են պրոցեսի իրականացման երկու ուղի՝ ցածր ջերմաստիճաններում մեթանոլի առավել առաջացմամբ և ոչ իզոթերմ պայմաններում սինթեզ գազի (H_2 և CO -ի) ստացմամբ: Վերլուծության արդյունքները հաստատվել են նախնական փորձնական տվյալներով:

**KINETIC PECULIARITIES OF NATURAL GAS OXIDATION IN THE
PRESENCE OF PROPANE ADDITIONS. MATHEMATICAL SIMULATION**

A. A. MANTASHYAN and E. R. MARKARYAN

The analysis of natural gas (methane) oxidation mechanism in the presence of propane additions under different conditions was carried out by the mathematical simulation. Two directions of process execution were revealed: a) Preferential formation of methanol with decreasing of temperature; b) Formation of H_2 and CO mixture (synthesis gas) under nonisothermal conditions. The results of mathematical simulation were verified by preliminary experimental data.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Mantashyan A. A., Sarkisyan L. A.* // Chem. Phys. Reports, 2000, v.19, №2, p.419.
- [2] *Манташян А. А.* // Химическая физика, 1996, т.15, №4, с. 75-87.
- [3] *Mantashyan A. A.* // Chem. Phys. Reports, 1996, v.15, №4, p. 545.

Институт химической физики
им А. Б. Налбандяна НАН
Республики Армения, Ереван

**Ա. Ա. ՄԱՆՏԱՇՅԱՆ
Է. Ր. ՄԱՐԿԱՐՅԱՆ**

Поступило 2 XII 2003