

**Изучение химической и тепловой структуры предварительно перемешанных пламен метилгексаноата и этилпентаноата**

Осипова К.Н.

Новосибирский государственный университет

Институт химической кинетики и горения СО РАН, г. Новосибирск

Сложные метиловые и этиловые эфиры жирных кислот входят в состав биодизеля. Истощение запасов нефти делает исследования таких топлив особенно актуальными. Биодизельные топлива могут быть использованы как индивидуально, так и в составе смесей с традиционным дизельным топливом. Такой подход позволяет уменьшить выбросы вредных химических соединений, таких как углекислый газ, окиси азота, сажа и др.

Основная задача состоит в изучении химической и тепловой структуры пламен эфиров, являющихся изомерами – метилгексаноата ( $C_7H_{14}O_2$ , МНе) и этилпентаноата ( $C_7H_{14}O_2$ , ЕРе) экспериментально и при помощи численного моделирования.

В работе изучалась структура следующих пламен предварительно перемешанных газообразных смесей стехиометрического состава: МНе/ $O_2$ /Ar и ЕРе/ $O_2$ /Ar. Пламена стабилизировались на плоской горелке при атмосферном давлении. Химическая структура пламени исследовалась методом зондовой молекулярно-пучковой масс-спектрометрии. Профили температуры измерялись с помощью микротермопар.

В ходе работы измерены профили концентраций реагентов (топлива и кислорода), основных продуктов горения ( $H_2O$ ,  $CO_2$ ,  $CO$ ,  $H_2$ ), а также промежуточных соединений ( $CH_3$ ,  $CH_4$ ,  $C_2H_2$ ,  $C_2H_4$ ,  $CH_2O$  и др.). Моделирование структуры пламен проводилось с помощью программы PREMIX из пакета CHEMKIN-II с использованием двух детальных химико-кинетических механизмов окисления эфиров: Dayma G. et al (Energy Fuel. 26 (2012) 6669) и Korobeinichev O.P. et al (Zeitschrift fur Physikalische Chemie. 229 (2015) 759). Экспериментальные данные сопоставлены с данными численного моделирования структуры пламени.

Установлено, что моделирование с удовлетворительной точностью описывает экспериментально измеренные профили основных стабильных соединений в пламенах. Анализ результатов численного моделирования структуры изученных пламен позволил провести анализ первичных путей превращения МНе и ЕРе в пламени.

Работа выполнена при поддержке РФФИ по гранту №15-08-05553  
Научный руководитель: канд. хим. наук Шмаков А.Г.