

工程热物理所氮燃料热解和低温氧化研究取得进展

化石燃料的高效清洁利用对解决日益严重的环境问题具有重要意义。燃烧过程中产生的氮氧化物 (NO_x) 会引起酸雨、光化学烟雾等环境问题。因此, 需要严格控制 NO_x 的排放。目前, NO_x 的排放主要来源于含氮燃料的燃烧过程。通过建立含氮燃料燃烧动力学模型, 可以掌握含氮燃料燃烧过程中氮的转移规律, 为控制 NO_x 排放具有重要的指导意义。

近日, 中国科学院工程热物理研究所新技术实验室研究人员针对含氮燃料的低温氧化和热解过程进行了相关研究, 使用了可调谐真空紫外光电离和分子束质谱技术研究了含氮燃料的模型分子, 硝基甲烷和吡啶热解及低温氧化主要产物和中间组分, 实验发现了新的中间产物, 基于实验发展了硝基甲烷和吡啶的动力学模型。生成速率分析表明, 在硝基甲烷低温氧化过程中, 由于碳氮键断裂和漫游介导异构化作用, 硝基甲烷热解和氧化的主要分解途径不同; 而在吡啶的低温氧化过程中, 吡啶主要通过 $\text{C}_5\text{H}_5\text{N} \rightarrow \text{C}_5\text{H}_4\text{N} \rightarrow \text{C}_5\text{H}_4\text{NO}_2 \rightarrow \text{HCN} + \text{CO} + \text{CH}_2\text{CHCO}$ 和 $\text{C}_5\text{H}_5\text{N} \rightarrow \text{C}_5\text{H}_5\text{NO} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2 + \text{HCN} + \text{CH}_2\text{CO}$ 两条路径进行消耗。灵敏度分析表明, 碳氮键断裂和漫游异构化作用在低温氧化及热解过程中均对硝基甲烷的消耗有促进作用; 在吡啶的低温氧化过程中, $\text{C}_5\text{H}_4\text{N} + \text{O}_2 \rightarrow \text{C}_5\text{H}_4\text{NO}_2$ 和 $\text{C}_5\text{H}_5\text{N} + \text{OH} \rightarrow \text{C}_5\text{H}_4\text{N} + \text{H}_2\text{O}$ 反应对吡啶消耗有显著的促进作用, 而 $\text{C}_5\text{H}_4\text{N} + \text{HO}_2 \rightarrow \text{C}_5\text{H}_4\text{NO} + \text{OH}$ 则起到较强的抑制作用。

上述研究得到国家自然科学基金重大研究计划、面上基金、科技部重点研发计划课题和中组部青年千人计划项目的支持。相关研究在 *Combustion and Flame* (2019, 202: 394-404; 2019, 203: 247-254) 发表论文2篇。

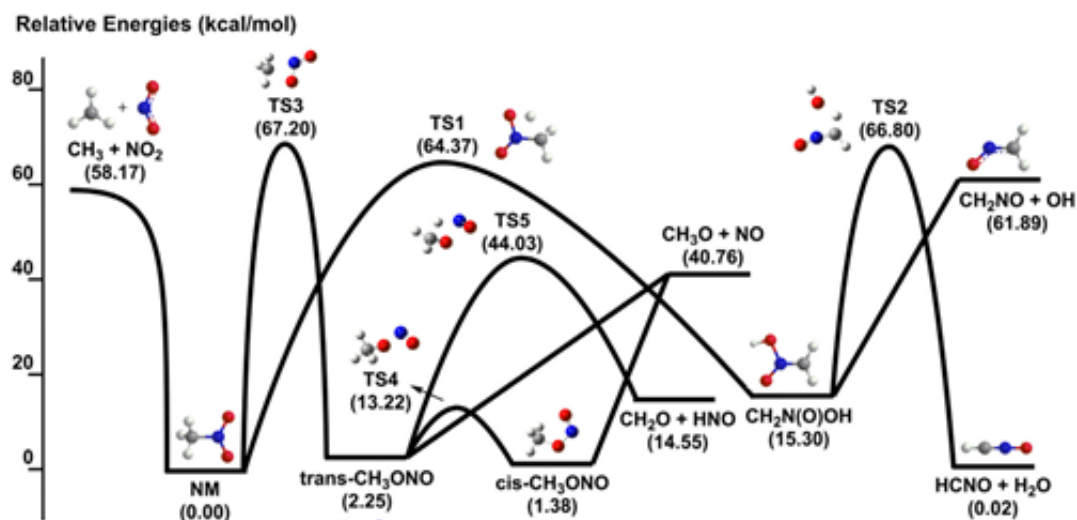


图1 硝基甲烷在0K时分解的势能面

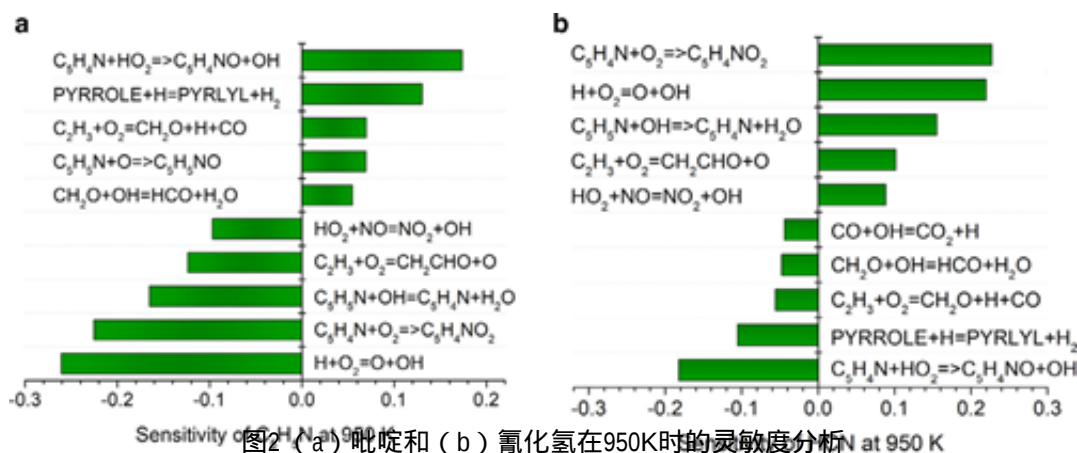


图2 (a) 吡啶和 (b) 氰化氢在950K时的灵敏度分析

原文地址: <http://www.china-nengyuan.com/tech/137945.html>