

УДК 543.51

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИИ ФЕНИЛ-РАДИКАЛА С АЦЕТИЛЕНОМ© Нагаева А.П.¹, Аяззов В.Н.^{1,2}¹ Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С.П. Королева, г. Самара, Российская Федерация² Самарский филиал Физического института им. П.Н. Лебедева
Российской академии наук (СФ ФИАН), г. Самара, Российская Федерация

e-mail: anastasiangv19@gmail.com

Загрязнение окружающей среды – одна из важнейших проблем современности. Большой процент потребляемой человеком энергии в мире производится различными энергетическими установками, использующими углеводородное топливо. В современном мире растущее энергопотребление в основном за счет углеводородного топлива провоцирует глобальное потепление и ухудшение экологии [1]. Полициклические ароматические углеводороды (ПАУ) и сажа, образующиеся в результате неполного сгорания углеводородного топлива, являются основными загрязняющими веществами, опасными для здоровья человека и экосистемы. Хотя ПАУ и вредны для форм жизни на Земле, для астрохимии и астробиологии они представляют интерес. ПАУ считаются возможным исходным материалом для самых ранних форм жизни [2–3]. Детальное понимание процессов образования ПАУ и сажеобразования является важной исследовательской целью с точки зрения как фундаментальной науки, так и инженерии.

Одним из основных механизмов формирования и роста ПАУ является механизм отделения водорода с последующим присоединением ацетилена (НАСА), который предполагает повторяющуюся последовательность отделений атома водорода из реагирующего ароматического углеводорода с последующим добавлением молекулы ацетилена (C_2H_2) к радикальному участку [4].

Целью данной работы являются исследование механизма НАСА на простейшем ПАУ и проведение эксперимента с помощью метода молекулярно-пучковой масс-спектрометрии с целью исследования реакции фенил-радикала с ацетиленом, конечным продуктом которой должен быть нафталин.

В эксперименте смесь ацетилена и нитрозобензола (прекурсора фенил-радикала) подавалась в высокотемпературный микрореактор через импульсный клапан, который открывался на 80 мкс с частотой 10 Гц. После попадания смеси в микрореактор в ней инициировались различные химические реакции посредством нагрева от стенок, которые поддерживались при заданной температуре (800–1200 К). Продукты и интермедиаты реакции на выходе из микрореактора претерпевали сверхзвуковое расширение в вакуум с формированием молекулярного пучка, который подвергался мягкой однофотонной ионизации вакуумным ультрафиолетом с длиной волны 118 нм между пластинами масс-спектрометра, после чего образовавшиеся катионы детектировались времяпролетным масс-спектрометром.

В рамках настоящей работы было проведено масс-спектрометрическое исследование механизма НАСА на примере реакции фенил-радикала с ацетиленом. На рисунке изображен один из записанных масс-спектров. По результатам исследования были обнаружены массовые пики нафталина, фенилацетилена, фенил-радикала,

дифенила, что позволяет сказать, что в настоящем эксперименте наблюдался механизм НАСА.

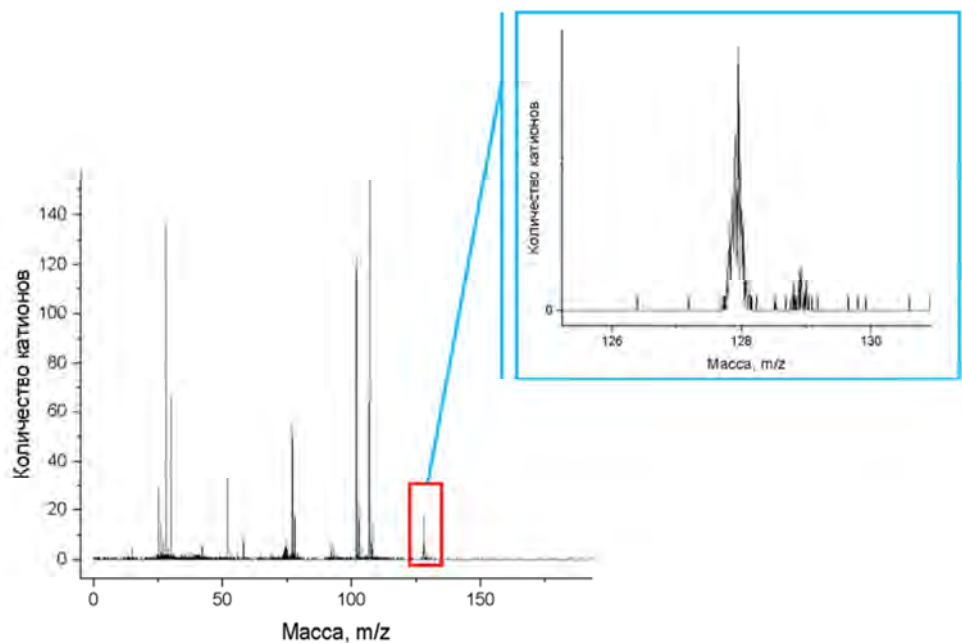


Рисунок – Масс-спектр записанный при температуре 1000 К и давлении 300 Торр

Библиографический список

1. Олейников А.Д. и др. Исследования механизмов роста третьего ароматического кольца через реакции 2-нафтила $C_{10}H_7$ с метилацетиленом и алленом C_3H_4 // Труды конференции-конкурса молодых физиков. М.: Издательский дом Московского физического общества, 2019. Т. 25, № S2. С. 139–140.
2. Hoover R. Need to track organic nano-particles across the universe? NASA's got an app for that // NASA. Retrieved February. 2014. Т. 22. С. 2014.
3. Allamandola L.J. et al. Cosmic Distribution of Chemical Complexity // Ames Research Center. 2009.
4. Frenklach M., Feigelson E.D. Formation of polycyclic aromatic hydrocarbons in circumstellar envelopes // The Astrophysical Journal. 1989. Т. 341. С. 372–384.