

## ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИИ ФЕНИЛ-РАДИКАЛА С АЦЕТИЛЕНОМ

Нагаева А.П.<sup>1</sup>, Аязов В.Н.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Самарский университет, г. Самара, [anastasiangv19@gmail.com](mailto:anastasiangv19@gmail.com)

<sup>2</sup>Филиал ФИАН, г. Самара

*Ключевые слова:* выбросы вредных веществ, механизм НАСА.

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. Сажа и полициклические ароматические углеводороды (ПАУ) относятся к основным вредным выбросам энергогенераторов, работающих на углеводородном топливе. Методом борьбы с этими угрозами является ужесточение Международных норм по содержанию в выбросах энергогенерирующих установок вредных веществ (окислы азота, углерода и серы, ПАУ, сажа и т.д.). Для развития технологии “чистого” горения необходимо понять механизмы формирования ПАУ и их разложения в процессе горения.

Целью данной работы является экспериментальное исследование образования простейшего ПАУ (нафталина) с помощью метода молекулярно-пучковой масс-спектрометрии.

В процессе работы 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 был проведен масс-спектрометрическое исследование механизма НАСА на примере реакции фенил-радикала с ацетиленом. На рис. 1, изображён 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.

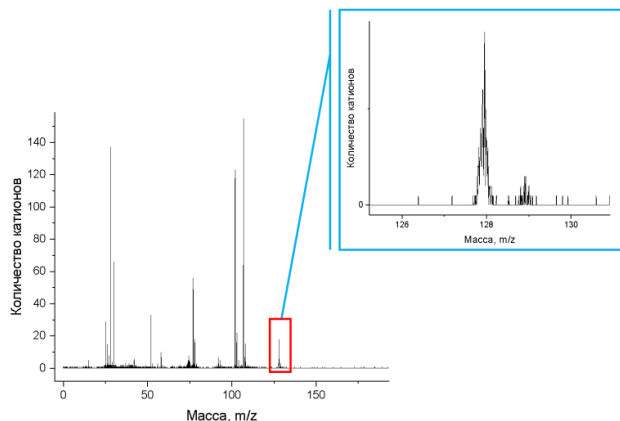


Рисунок 1 – Масс-спектр записанный при температуре 1000 К и давлении 300 Торр

### Список литературы

1. Frenklach M., Feigelson E. D. Formation of polycyclic aromatic hydrocarbons in circumstellar envelopes //The Astrophysical Journal. – 1989. – Т. 341. – С. 372-384.
2. Mebel A. M., Landera A., Kaiser R. I. Formation mechanisms of naphthalene and indene: from the interstellar medium to combustion flames //The Journal of Physical Chemistry A. – 2017. – Т. 121. – №. 5. – С. 901-926.

### Сведения об авторах

Нагаева А.П., студент. Область научных интересов: физика и химия горения, химическая физика, масс-спектрометрия.

Порфирьев Д.П., к.ф.-м.н., доцент. Область научных интересов: квантовая химия, горение, кинетика, полициклические ароматические углеводороды, ПАУ, газовая динамика, закрученные потоки, газовый разряд, плазмохимия.

Аязов В.Н. – д.ф.-м.н., директор СФ ФИАН. Область научных интересов: физика, химия, астрономия, химическая инженерия, материаловедение.

## EXPERIMENTAL STUDY OF THE REACTION OF A PHENYL RADICAL WITH ACETYLENE

Nagaeva A.P.<sup>1</sup>, Porfirev D.P.<sup>1,2</sup>, Azyazov V.N.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Samara University, Samara, Russia, [anastasiangv19@gmail.com](mailto:anastasiangv19@gmail.com)

<sup>2</sup>FIAN branch, Samara

*Keywords: emissions of harmful substances, HACA mechanism.*

Environmental pollution is one of the most important problems of our time. Soot and polyaromatic hydrocarbons (PAHs) are among the main harmful emissions from power generators operating on hydrocarbon fuel. To reduce harmful emissions, it is necessary to understand the mechanisms of PAH formation and their decomposition during combustion. The purpose of this work is an experimental study of the formation of the simplest PAH (naphthalene) using the method of molecular beam mass spectrometry. In the framework of this work, a mass spectrometric study of the HACA mechanism was carried out using the reaction of a phenyl radical with acetylene as an example. According to the results of the study, mass peaks of naphthalene, phenylacetylene, phenyl radical, diphenyl were found, which allows us to say that in this experiment the HACA mechanism was observed.