



Цифровая модель лазерного реактора каталитической конверсии метана в углеводороды и водород¹

Снытников В.Н., Пескова Е.Е.

Институт катализа имени Г.К.Борескова СО РАН, Новосибирск

Современное развитие химических технологий направлено, в частности, на создание малотоннажной переработки метана в этилен, ацетилен, водород. Нами было предложено искать решение этой задачи на путях лазерной термохимии. В этой области химические реакторы разрабатываются на основе воздействия лазерного излучения на реакционную среду. В нашем случае, это газ метан и нанометровые каталитические частицы, которые витают в объеме. Частицы нагреваются излучением, становясь объемным источником радикалов. Сверхравновесная концентрация радикалов в газе ведет к синтезу непредельных углеводородов из метана при относительно невысоких температурах реакционного газа. Размеры оксидных частиц в первом десятке нанометров обеспечивают быстрый сброс их температуры вне лазерного излучения, что приводит к торможению вторичных реакций и к закалке получаемых продуктов.

Для нестационарных задач лазерной термохимии нами разработана математическая модель [1], численный алгоритм и собственный CFD код. В нем

в комплексе решаются задачи дозвуковой многокомпонентной газодинамики с изменением объема из-за химических реакций, с динамикой многокомпонентной пыли, гетерогенно-гомогенной кинетикой радикальных цепных реакций для углеводородов, с переносом и поглощением излучения. Используя этот код, нами создана цифровая модель лабораторного реактора с перспективой масштабного перехода к реакторам большей производительности.

Цифровая модель лазерного реактора с течением газа и твердых наночастиц рассчитывается в двумерной осесимметричной геометрии со стенками, через которые осуществляется нагрев среды помимо лазерного излучения. В реакторе происходит встречное столкновение нагретой газопылевой смеси и метана пониженной температуры без каталитических наночастиц. Лазерное излучение вводится в однофазный поток метана. Оно поглощается в зоне повышенной концентрации этилена. Реакционная среда с продуктами конверсии метана выводится через боковое отверстие в стенке трубы. Лазерный синтез непредельных углеводородов из природного газа изучен для различных параметров. Выяснилось, что на реакционной длине до 40 см изменение числа частиц диаметром 10 нм в диапазоне 1018 - 1019 м⁻³ ведет к изменению выходов продуктов в десятки раз при прочих

¹Работа выполнена при поддержке РФФ (грант No 21-19-00429)

одинаковых значениях интенсивности излучения до 100 Вт, температуры смеси и стенок реактора и пр. Поиск активного катализатора и экспериментальное измерение для него энергии активации метана стало одной из ключевых задач проектирования лабораторного реактора. В целом, изучение цифровой модели реактора показало возможность получить высокие, более 60% конверсии сырья в водород и другие целевые продукты в ламинарных

потоках без дополнительной закалки продуктов при использовании технологических лазеров умеренной мощности.

Список литературы

- [1] Снытников В.Н., Пескова Е.Е., Стояновская О.П. Модель двух-температурной среды газ – твердые наночастицы с лазерным пиролизом метана // Математическое моделирование. 2023. Т. 35. № 4. С. 24 – 50