

Отзыв

официального оппонента на диссертацию Ахуньянова Артура Ринатовича на тему: «Влияние продуктов газификации биомассы и процесса образования сажи на конверсию метана в синтез-газ», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 — химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества

Диссертационная работа Ахуньянова Артура Ринатовича посвящена исследованию влияния процесса сажеобразования в газовой фазе и продуктов газификации биомассы на конверсию метана в синтез-газ. Автором выполнено тестирование разработанного кинетического механизма на экспериментальных данных по пиролизу и окислению метана, полученных на ударных трубах разной конструкции. Получены новые экспериментальные данные по температурной зависимости выхода сажи при пиролизе и окислении метана. Продemonстрировано влияние процесса образования сажи на температуру парциального окисления неразбавленных богатых смесей метана с добавками H_2O и CO_2 путем численных расчетов с использованием единого кинетического механизма сажеобразования. Бескислородная конверсия метана в синтез-газ с добавками характерными для продуктов газификации биомассы исследована численно, и выполнено прямое сравнение с результатами экспериментов в проточном реакторе. Показано согласие результатов расчетов с экспериментальными данными. Определены параметры процесса бескислородного окисления метана молекулами CO_2 с образованием CO в отраженных ударных волнах.

Диссертация Ахуньянова А.Р. состоит из введения, пяти глав, раздела с основными результатами и выводами и списка литературы. Список цитируемой литературы к диссертации насчитывает 109 наименований.

В первой главе, представляющей собой литературный обзор, описан процесс пиролиза и окисления метана с различными добавками. Обсуждаются основные способы получения синтез-газа из метана. Рассмотрены современные кинетические механизмы окисления и пиролиза легких углеводородов.

Во второй главе описан экспериментальный метод оптического определения выхода сажи и ее температуры. Представлено краткое описание кинетического механизма реакций в газовой фазе и модели образования ансамбля частиц сажи, используемых в расчетах.

Третья глава посвящена тестированию кинетического механизма сажеобразования путем сравнения результатов расчетов с экспериментальными данными по пиролизу и окислению метана в экспериментах на ударных трубах различной конструкции.

В четвертой главе рассмотрено влияние сажеобразования на окислительную конверсию неразбавленных смесей метана с добавками H_2O и CO_2 .

Пятая глава посвящена исследованию бескислородной конверсии в аргоне смесей метана с добавками H_2 , H_2O , CO и CO_2 , являющимися основными продуктами газификации биомассы. Рассмотрено окисление метана молекулами CO_2 в бескислородной смеси с образованием CO . В экспериментах на ударной трубе определены интервалы температуры и давления за отраженной ударной волной, когда этот процесс начинает явно проявляться.

Диссертационная работа написана хорошим научно-литературным языком. Основные выводы обоснованы приведенным экспериментальным материалом и проведенными детальными кинетическими расчетами, сомнений в их корректности нет.

Несмотря на общий достаточно высокий экспериментальный и теоретический уровень работы, к ней имеется ряд замечаний и вопросов.

1. При сравнении влияния добавки H_2O и CO_2 сделан вывод, что - «Поэтому при добавлении H_2O конечная концентрация H_2 почти вдвое выше, чем при добавлении CO_2 .» (рис. 5 и 6 Автореферата, рис. 24 и 25 Диссертации). Однако на рис.5 (рис. 24) концентрация водорода находится около нулевого значения (добавка H_2O), при этом на рис. 6 (рис. 25) она гораздо больше нуля (добавка CO_2). Почему сделан такой вывод? На стр. 62 к описанию рис. 24 сказано – «При добавлении H_2O концентрация CO ко времени 1 с достигает уровня $1 \cdot 10^{-6}$ моль/см³, однако концентрация атомов водорода в этот момент времени существенно выше величины $7 \cdot 10^{-6}$ моль/см³,...». Однако на рис. 24 концентрации как водорода, так и монооксида углерода находятся около нулевого значения.

2. На рис. 24 (рис. 5 Автореферата) представлены результаты расчета концентраций продуктов смеси метан/кислород/вода. При окислении метана следует ожидать появления двух продуктов окисления – воды и диоксида углерода. Для воды наблюдается рост концентрации в зоне окисления, однако оксиды углерода имеют практически нулевую концентрацию.

Заметную концентрацию имеет только один углеродсодержащий продукт – это ацетилен. Почему углерод в зоне окисления переходит сразу в ацетилен, минуя образование оксидов?

3. Четвертая задача работы сформулирована как – «На основе экспериментов в ударной трубе и результатов кинетических расчетов проанализировать возможность использования CO_2 в качестве окислителя метана для получения синтез-газа из смесей $\text{CH}_4 + \text{CO}_2$ ». Однако, как отмечают и сами авторы, в настоящее время не только показана **возможность**, но и проводятся исследования этого процесса (см. п. Углекислотная конверсия метана с указанием ссылок на такие работы). То же самое относится и к п. «Научная новизна», где утверждается – «Впервые определены условия, при которых CO_2 может быть использован в качестве окислителя в процессе бескислородной конверсии CH_4 ». Необходимо пояснение.

4. В п. 3.1 и 3.2 диссертации проводится сравнение расчетных результатов по пиролизу и оксипиролизу метана с экспериментальными данными работы [94] – «Hidaka Y., Sato K., Henmi Y., Tanaka H., Inami K. Shock-tube and modeling study of ethane pyrolysis and oxidation // Combustion and Flame. — 1999. — V. 118, № 3. — P. 340–358.» (см. п. 3.1.1 и 3.1.3 и 3.2.1 и 3.2.2). Однако в работе [94] исследуются смеси на основе этана. Откуда брались экспериментальные данные по метану для сравнения (может в работе указана некорректная ссылка)?

Высказанные замечания не затрагивают сути и основных выводов и ни в коей мере не снижают высокую оценку диссертационной работы Ахуньянова А.Р. Выполнена большая по объему работа, получены новые экспериментальные данные по выходу сажи, усовершенствован газофазный механизм реакций пиролиза и окисления метана и других легких углеводородов и предложена единая детальная кинетическая модель сажеобразования. Расчеты с использованием модели согласуются с экспериментами других авторов. Содержание автореферата полностью соответствует диссертации. Опубликованные статьи в достаточной степени отражают основные результаты работы.

Диссертация соответствует требованиям пункта 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 года, и «Изменений, которые вносятся в Положение о присуждении ученых

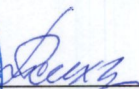
степеней», утвержденных постановлением Правительства Российской Федерации № 335 от 21 апреля 2016 года, и является научно-квалификационной работой, в которой содержится решение научной задачи, связанной с определением кинетических закономерностей конверсии метана в синтез-газ с учетом образования сажи. Автор диссертации Ахуньянов Артур Ринатович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 — химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Официальный оппонент
доктор физико-математических наук,
ведущий научный сотрудник лаборатории горения
в высокоскоростных потоках
Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Федерального исследовательского центра проблем химической физики и
медицинской химии Российской академии наук
(ФИЦ ПХФ и МХ РАН)



Е.А. Салганский

Подпись Е.А. Салганского заверено:
Ученый секретарь ФИЦ ПХФ и МХ РАН
Д.Х.Н.

Б.Л. Психа

«16» мая 2025 г.

Адрес: 142432, Россия, г. Черноголовка, пр. Академика Семенова, д. 1.
Телефон: +7 (49652) 2-13-68
E-mail: sea@icp.ac.ru